

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

ВІДДІЛЕННЯ ФІЗИКО-ХІМІЇ ГОРЮЧИХ КОПАЛИН
ІНСТИТУТУ ФІЗИКО-ОРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ І ВУГЛЕХІМІЇ ім. Л. М. ЛИТВИНЕНКА

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Директор Відділення ФХГК ІнФОВ

Л. М. Литвиненка НАН України

С. Н. С., К. Х. Н.

Г. Г. МІДЯНА

«30» грудня 2017 р.



СИЛАБУС З ДИСЦИПЛІНИ

«Математичне та комп'ютерне моделювання в хімії»

ГАЛУЗЬ ЗНАНЬ
СПЕЦІАЛЬНІСТЬ
СПЕЦІАЛІЗАЦІЯ
РІВЕНЬ ОСВІТИ

10 – ПРИРОДНИЧІ НАУКИ
102 – «ХІМІЯ»
«ФІЗИЧНА ХІМІЯ»
ТРЕТІЙ (ОСВІТНЬО-НАУКОВИЙ)

м. Львів 2017 р.

Силабус з навчальної дисципліни «Математичне та комп'ютерне моделювання в хімії» для аспірантів у галузі знань 10 – «Природничі науки», спеціальності 102 – «Хімія» (спеціалізації «Фізична хімія») (третій освітньо–науковий рівень освіти).

«30» грудня 2017 р. – 11 с.

Розробник: д. х. н., проф., гол. н. с. відділу хімії окислювальних процесів Відділення ФХГК ІнФОВ ім. Л. М. Литвиненка НАН України Й. О. Опейда

Силабус затверджений на засіданні Вченої ради Відділення фізико– хімії горючих копалин Інституту фізико–органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України (протокол № 17 від «30» грудня 2017 року).

© Опейда Й. О., 2017

© Відділення фізико–хімії горючих копалин Інституту фізико–органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України

Назва курсу	МАТЕМАТИЧНЕ ТА КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ В ХІМІЇ
Адреса викладання курсу	Наукова лабораторія Відділення фізико-хімії горючих копалин Інституту фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України; вул. Наукова, 3а, кімн. № 144
Відділ, за яким закріплена дисципліна	Відділ хімії окислювальних процесів
Галузь знань, шифр та назва спеціальності	10 Природничі науки 102 Хімія
Викладачі курсу	Опейда Йосип Олексійович, д. х. н., професор, гол. н. с. відділу хімії окислювальних процесів.
Контактна інформація викладачів	Відділ хімії окислювальних процесів, вул. Наукова, 3а, кімн. № 144; (032) 263 5174 електронна пошта: Opeyda.Io.O@nas.gov.ua
Консультації по курсу відбуваються	1) очно при попередній домовленості з викладачем за адресою: Відділ хімії окислювальних процесів, вул. Наукова, 3а, кімн. № 144; 2) заочно через електронну пошту
Інформація про курс	«Математичне та комп'ютерне моделювання в хімії» є обов'язковим для вивчення компонентом освітньо-нау- кової програми підготовки доктора філософії за спеці- альністю 102 «Хімія». Обсяг дисципліни – 90 годин (3 кредити ECTS), в тому числі аудиторних – 30 годин для денної та 15 годин для заочної форми навчання
Коротка анотація курсу	Завданнями курсу є: розкриття смислу методу моделю- вання, навчити аспіранта бачити області його застосу- вання і можливості при вирішенні конкретних хімічних проблем; виділити методологічно важливі питання хімії і на конкретних прикладах показати взаємозв'язок мето- ду моделювання з іншими дисциплінами хімічного і при- родничо-наукового циклів; 3) розвиток умінь, що допо- можуть застосовувати теорію та практику моделювання до вирішення різних задач, користуватися сучасними ба- зами даних та довідниками для створення математичних моделей, обґрунтовано оцінювати адекватність моделей та їх застосовність у конкретних умовах.

<p>Мета та цілі курсу</p>	<p>Метою курсу «Математичне та комп'ютерне моделювання в хімії» є: загально-педагогічна – підготовка спеціалістів-хіміків, які вміють застосовувати методи комп'ютерного та математичного моделювання для вирішення поточних хімічних проблем; дидактична – засвоєння знань, що передбачені програмою, завдяки цілеспрямованій співпраці викладача і аспіранта; методична – виділити головну ланку в кожній темі, що сприятиме формуванню основних понять з курсу, формуванню знань у результаті активізації пізнавальної діяльності аспірантів, застосування методів активного навчання.</p>
<p>Література для вивчення дисципліни</p>	<p>Базова</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Математичне та комп'ютерне моделювання в хімії: підручник / Й. О. Опейда. – Вінниця: ДонНУ, 2015. – 388 с. (з грифом МОН, лист № 1/11–7540 від 20.05.2014 р.) 2. Комп'ютери та експеримент у хімії / Й. О. Опейда. – Вінниця, Львів: ДонНУ, 2016. – 196 с. 3. Опейда Й.О. Математичне та комп'ютерне моделювання в хімії. – Донецьк: Видавництво ДонНУ, 2014. - 387 с 4. Іщенко О. В., Михальчук В. М., Біла Н. І., Гайдай С. В., Білий О. В. Статистичні методи у хімії. – Донецьк: Видавництво ДонНУ, 2012. - 504 с. 5. Михальчук В. М., Біла Н. І. Практикум зі статистичної обробки експерименту в хімії* – Донецьк: ДонНУ, 2006. – 113 с. 6. Михальчук В. М., Михальчук А.В. "Линейный регрессионный анализ результатов химического эксперимента в системе STATISTICA"* – Донецьк: ДонНУ, 2002. –66 с. 7. Ракша О. В., Пастернак О. М., Туровський М. А. Інформатика, інформаційні технології. ДонНУ, 2011. – 118 с. 8. Туровський М. А., Пастернак О. М. Комп'ютерна структурна хімія* - Донецьк: ДонНУ, 2009. –153 с.

<p>Література для вивчення дисципліни</p>	<p>Допоміжна</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Ахназарова С. Л., Кафаров В. В. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии. М.: Высш. шк., 1985. 327 с. 2. Браверман Э. М., Мучник И. Б. Структурные методы обработки эмпирических данных. – М.: Наука, 1983. 3. Закгейм А. Ю., Ведение в моделирование химико-технологических процессов, М., Химия, 1973, 223с. 4. Евсеев А. М., Николаева Л. С. Математическое моделирование химических равновесий. М. МГУ, 1988. 5. Краснощеков П. С, Петров А. А. Принципы построения моделей.— М.: Изд-во МГУ, 1983. 6. Математическое моделирование / Под ред. Дж. Эндрюса, Р. Мак-Лоуна,— М.: Мир, 1979. 7. Морозов К. Е. Математическое моделирование в научном познании. – М.: Мысль, 1969. 8. Мышкис А. Д. Элементы теории математических моделей. Изд. 3-е, М.: КомКнига, 2007. – 192 с. 9. Налимов В. В., Голикова Т. И. Логические основания планирования эксперимента. – 2-е изд. – М.: Металлургия, 1981. 10. Оран Е., Борис Дж., Численное моделирование реагирующих потоков. Мир, М. 1990, 601 с. 11. Писаренко В. Н., Погорелов А. Г. Планирование кинетических исследований. – Москва. Наука, 1969, 175 с. 12. Рудный Е. Б. Математическое моделирование в химической термодинамике – М. МГУ, 1995 г. 13. Спиридонов В. В., Лопаткин А. А. Математическая обработка физико-химических данных. М.: МГУ, 1970. – 221 с. 14. Холин Ю. В. Количественный физико-химический анализ комплексообразования в растворах и на поверхности химически модифицированных кремнеземов. Содержательные модели, математические методы и их приложения. Харьков, Фолио, 2000, 285с.
<p>Тривалість курсу</p>	<p>П рік підготовки, 3 семестр 90 годин</p>

<p>Очікувані результати навчання</p>	<p>В результаті вивчення навчального матеріалу аспірант повинен знати:</p> <ul style="list-style-type: none"> • основні поняття методів комп'ютерного та математичного моделювання; • розуміти принципові можливості застосування методів комп'ютерного та математичного моделювання для дослідження конкретних хімічних проблем. <p>вміти:</p> <ul style="list-style-type: none"> • засобами математичного та комп'ютерного моделювання аналізувати фізичні та хімічні явища і процеси; • застосовувати хімічні закони для створення моделей хімічних процесів; • обґрунтовувати постановку хімічного експерименту; • проаналізувати результати хімічного експерименту та оцінити їх точність; • побудувати адекватну математичну модель процесу; • візуалізувати результати експерименту та моделювання — будувати графіки, таблиці, діаграми, які описують модельовані процеси та явища.
<p>Формат курсу</p>	<p>Очний / заочний. Лекційні та семінарські заняття, проведення консультацій у випадку труднощів із засвоєнням матеріалу</p>
<p>Теми</p>	<p>Змістовий модуль 1. Основні положення методу моделювання</p> <p>ТЕМА 1. Історичний огляд розвитку методу моделювання. Метод моделювання, його місце в системі природничих і хімічних наук. Основні поняття методу моделювання. Поняття моделі. Особливості моделювання хімічних явищ та процесів.</p> <p>ТЕМА 2. Експеримент у хімії. Вимірювання. Прямі і непрямі вимірювання. Форми представлення даних. Шкали для представлення результатів. Оцінка точності отримуваних даних. Випадкові похибки. Систематичні по-</p>

	<p>хибки, їх джерела і виявлення. Результат вимірювання. Повторюваність, відтворюваність.</p> <p>Змістовий модуль 2. Принципи класифікації моделей</p> <p>ТЕМА 3. Принципи, покладені в основу поділу моделей на класи. Класифікація моделей за способом представлення, за стороною відображення суті оригіналу та за призначенням. Моделі прості і складні, статичні і динамічні.</p> <p>ТЕМА 4. Основні типи моделей в хімії. Структурні моделі в хімії. Формульні (символьні) моделі в хімії. Їх типи. Експериментальні моделі в хімії. Демонстраційні моделі в хімії. Моделі-уявлення в хімії.</p>
<p>Теми</p>	<p>Змістовий модуль 3. Математичні та комп'ютерні моделі.</p> <p>ТЕМА 5. Математична модель, її аспекти. Вимоги до математичних моделей. Комп'ютерні моделі, їх особливості. Математичні моделі в теоретичній та прикладній хімії.</p> <p>ТЕМА 6. Основні етапи розробки моделі. Постановка завдання. Джерела хімічної інформації. Сучасні засоби пошуку хімічної інформації. Поділ моделей в залежності від наявної інформації про них. Моделі білий ящик, сірий ящик і чорний ящик.</p> <p>Змістовий модуль 4. Розробка математичної моделі.</p> <p>ТЕМА 7. Розробка концептуальної моделі. Встановлення змінних моделі. Принципи вибору типу математичної моделі. Стохастичні (статистичні) і детерміновані математичні моделі. Їх переваги, недоліки і сфери застосування.</p> <p>ТЕМА 8. Критерії оцінки адекватності моделі. Регресійний і кореляційний аналіз. Помилки першого і другого роду. Встановлення границь застосовності моделі. Методи розширення границь застосовності. Представлення моделі.</p>

<p>Підсумковий контроль, форма</p>	<p>Усний іспит</p>
<p>Необхідне обладнання</p>	<p>Методичне забезпечення складається з:</p> <ul style="list-style-type: none"> – інтерактивного комплексу навчально–методичного забезпечення дисципліни; – конспекту лекцій на паперовому та електронному носіях; – методичних вказівок до семінарських занять на паперовому та електронному носіях; – друкованого роздаткового матеріалу; – матеріалів для демонстрування за допомогою технічних засобів навчання (слайди, відео– та аудіозаписів). – документації до програмного забезпечення – навчальні посібники, монографії, наукові статті.
<p>Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання дисципліни</p>	<ol style="list-style-type: none"> 1. Пояснювально-ілюстративний метод або інформаційно-рецептивний: <ul style="list-style-type: none"> • аспіранти одержують знання на лекції, з навчальної або методичної літератури, через екранний посібник в "готовому" виді; • аспіранти сприймають і осмислюють факти, оцінки, висновки й залишаються в рамках репродуктивного (відтворюючого) мислення. 2. Репродуктивний метод: <ul style="list-style-type: none"> • застосування створеної математичної моделі; • діяльність аспірантів носить алгоритмічний характер, тобто виконується за інструкціями, приписаннями, правилами в аналогічних, подібних з показаним зразком ситуаціях; • організовується діяльність аспірантів за кількарізовим відтворенням засвоєваних знань. Для цього використовуються різноманітні вправи, лабораторні, практичні роботи, програмований контроль; 3. Частково-пошуковий (або евристичний) метод: <ul style="list-style-type: none"> • полягає в організації активного пошуку рішення висунутих у навчанні (або сформульованих самостійно) пізнавальних завдань; • процес мислення поетапно направляється й контролюється викладачем або самими аспірантами на основі роботи над програмами (у тому числі й комп'ютерними) і навчальними посібниками. 4. Дослідницький метод: <ul style="list-style-type: none"> • проводиться аналіз матеріалу, аналіз постановки проблем і завдань, оцінка отримуваних результатів;

- аспіранти самостійно вивчають літературу, джерела, виконують інші дії пошукового характеру;
 - завдання, які виконуються з використанням дослідницького методу, повинні містити в собі всі елементи самостійного дослідницького процесу (постановку завдання, обґрунтування, припущення, пошук відповідних джерел необхідної інформації, процес рішення завдання);
5. Словесні методи: джерелом знання є усне або друковане слово (розповідь, бесіда, взаємний аналіз даних і ін.)
6. Практичні методи: аспіранти одержують знання й уміння, виконуючи практичні дії (пошук в електронних базах даних, вправа, тренування,).
7. Наочні методи: джерелом знань є спостережувані предмети, явища, наочні приклади (комп'ютерна візуалізація даних, ілюстрування, показ).
8. Дискусійні методи: елементи дискусії (аналіз проблеми з різних точок зору, зіставлення позицій, навмисного загострення й навіть перебільшення протиріч в досліджуваному матеріалі).

Критерії оцінювання навчальних досягнень аспірантів

Рівень, шкала ECTS, бали	Теоретична підготовка	Практичні вміння і навички
1	2	3
Високий, А, 91* – 100, відмінно – 5	<p>Аспірант має глибокі, міцні і систематичні знання всіх положень наукової методології, може не тільки вільно володіти матеріалом, але й самостійно довести існування певних закономірностей, принципів, використовує здобуті знання і вміння в нестандартних ситуаціях, здатний вирішувати проблемні питання. Відповідь аспіранта відрізняється точністю формулювань, логікою, достатній рівень узагальненості знань</p>	<p>Аспірант самостійно розв'язує типові ситуаційні задачі різними способами, стандартні, комбіновані й нестандартні казуси з наукової методології, здатний проаналізувати й узагальнити отриманий результат. При виконанні індивідуальних завдань та самостійних робіт аспірант дотримується усіх вимог, передбачених програмою курсу. Крім того, його дії відрізняються раціональністю, вмінням оцінювати помилки й аналізувати результати</p>
Вище середнього, Середній В, С, 81 – 90; 71 – 80; дуже добре, добре – 4	<p>Аспірант знає і може самостійно сформулювати основні методологічні підходи, принципи їх застосування, але не завжди може самостійно здійснити критичний аналіз. Аспірант може самостійно застосовувати знання в стандартних ситуаціях, його відповідь логічна, але розуміння не є узагальненим</p>	<p>Аспірант самостійно розв'язує типові (або за визначеним алгоритмом) з точки зору наукової методології завдання, володіє базовими навичками з виконання необхідних логічних операцій та перетворень, може самостійно сформулювати типову задачу за її словесним описом, скласти типову схему та обрати раціональний метод розв'язання, але не завжди здатний провести аналіз і узагальнення результату</p>
Достатній, D, E, 61 – 70, 51 – 60 задовільно, посередньо – 3	<p>Аспірант відтворює основні поняття і визначення курсу, але досить поверхово, не виділяючи взаємозв'язок між ними, може сформулювати з допомогою викладача основні методологічні положення, знає істотні ознаки (засади) основних підходів та їх відмінність, може записати окремі термінологічні дефініції теоретичного положення за словесним формулюванням і навпаки; допускає помилки, які повною мірою самостійно виправити не може</p>	<p>Аспірант може розв'язати найпростіші типові задачі за зразком, виявляє здатність виконувати основний елементарний аналіз конкретних наукових методів, але не спроможний самостійно сформулювати задачу за словесним описом і визначити метод її розв'язання. При вирішенні фабули аспірант виконує роботу за зразком, але з помилками; робить висновки, але не розуміє достатньою мірою мету роботи</p>

<p>Низький, FX / F 1 – 51, незадовільно – 2</p>	<p>Відповідь аспіранта при відтворенні навчального матеріалу елементарна ,фрагментарна, зумовлена нечіткими уявленнями про закони і методи. У відповіді цілком відсутня самостійність. Аспірант знайомий лише з деякими основними поняттями та визначеннями курсу, з допомогою викладача може сформулювати лише деякі основні положення теорії (риси, принципи)</p>	<p>Аспірант знає основні терміни та вміє розрізняти окремі закономірності. Вміє розв'язувати задачі лише на відтворення основних положень методології, здійснювати найпростіші логічні операції. При вирішенні фабули аспірант вміє користуватися окремими методологічними підходами але не може самостійно виконати роботу і зробити висновки</p>
--	---	--

Примітка:

*Відповіді, оцінені до 90 балів, можуть супроводжуватися додатковими питаннями – до 10 балів у сукупності.

Розподіл балів, що виставляються аспірантам (ПМК – I семестр)

Модуль I				Модуль II				Самостійна робота	Сума	
Поточний контроль Теми 1–5				Підсумковий контроль Теми 1–5	Поточний контроль Теми 6–9					Підсумковий контроль Теми 6–9
Теми 1–2	Тема 3	Тема 4	Тема 5		Теми 6–7	Тема 8	Тема 9			
5	5	5	5	10	5	5	5	25	30	100

**Шкала переведення академічних успіхів аспірантів
Відділення ФХГК ІнФОВ ім. Л. М. Литвиненка НАН України
в шкалу за системою ECTS**

Шкала оцінювання				
Оцінювання за національною шкалою		Оцінювання за шкалою ECTS		
Іспит	Залік	Інтервал за шкалою		
		накопичувальної системи	Оцінювання згідно з ECTS	
відмінно	зараховано	90–100	A	відмінно
добре		82–89	B	дуже добре
		74–81	C	добре
		64–73	D	задовільно
задовільно		60–63	E	достатньо
незадовільно	не зараховано	35–39	FX	незадовільно
		1–34	F	неприйнятно