

Методичні вказівки до практичних занять з дисципліни «Комп'ютерні розрахунки в хімії та хімічних технологіях»

Дисципліна вдосконалює знання та вміння студентів використовувати комп'ютерну техніку для розв'язання різноманітних задач. В наш час вирішення великого кола завдань в хімії і хімічній технології неможливе без звернення до математики та методів, які надають саме математика та її прикладні розділи (чисельні методи, математичне моделювання, методи оптимізації тощо). Вміння обробляти результати спостережень, здатність оцінювати параметри статистичних рядів розподілу, що отримані в результаті експериментальних досліджень, є ключовим вмінням для бакалавра з хімічних технологій.

Мета дисципліни – поглибити знання і вміння студентів використовувати сучасні програмні продукти для вирішення завдань хімії та хімічних технологій, використовувати сучасні методи статистичної обробки експериментальних даних та чисельного моделювання хімічних і хіміко-технологічних процесів.

Теми практичних занять.

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1.	Сучасний стан комп'ютерного програмного забезпечення для хімічних технологій.	2
2.	Найпростіші обчислення в системі сучасних програмних продуктів MathCad.	2
3.	Практика використання чисельних методів для вирішення завдань хімії та хімічної технології.	2
4.	Статична обробка експериментальних даних та встановлення числових характеристики випадкових величин (математичне сподівання, дисперсія, середнє квадратичне відхилення, довірчий інтервал) з використанням сучасних програмних продуктів	4

	MathCad.	
5.	Математичні моделі реакцій і хімічних процесів та їх вирішення сучасними продуктами. Обробка даних хімічного експерименту.	2
6.	Обробка та візуалізація експериментальних даних за допомогою Origin.	6
7	Пошук та проведення найпростіших математичних залежностей в Origin. Апроксимація графічних даних.	6

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Дубинін А. І. Використання пакета Mathcad у хімічній інженерії : навч. посіб. Львів : Львівська політехніка, 2010. 240с.

2. Литвин В. В. Методи та засоби інженерії даних та знань : навч. посіб. Львів : Магнолія 2006, 2012. 241с.

3. Николайчук Я. М., Возна Н. Я., Пітух І. Р. Проектування спеціалізованих комп'ютерних систем : навч. посіб. Тернопіль : ТзОВ "Терно-граф", 2010. 392с.

4. Соловьев М. Е., Соловьев М. М. Компьютерная химия [Электронный ресурс] : полнотекстовая база. Москва : Солон-Пресс, 2005. 536с.

5. Болотін О. В., Мага І. М., Нечипорук В. В., Ткач В. І. Математичне моделювання в мікробіології та хімічній технології харчових добавок : навч. посіб. Ужгород : В. Падяка, 2014. 368с.

6. Куліков С. І., Волкова С. А., Чернишов А. А. Основи програмування та обчислювальної математики : навч. посіб. Дніпро : ДВНЗ УДХТУ, 2018. 159 с.

7. Гумеров Ас. М., Валеев Н. Н., Гумеров Аз. М., Емельянов В. М. Математическое моделирование химико-технологических процессов : учеб. пособ. Москва : КолосС, 2008. 159с.

8. Очков В. Mathcad 12 для студентов и инженеров. СПб. : БХВ-Петербург, 2005. 464с.

9. Голеус В. І., Карасик О. В. Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології : навч. посіб. Дніпропетровськ : Літограф, 2016. 160с

10. Поликарпов В. М., Ушаков И. В., Головин Ю. М. Современные методы компьютерной обработки экспериментальных данных : учебн. пособ. Тамбов : Издательство ТГТУ, 2006. 84 с.