

кадр 2015

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Владимирский государственный университет
имени Александра Григорьевича и Николая Григорьевича Столетовых»
(ВлГУ)



По учебно-методической работе

А.А. Панфилов

«16» апреля 2015 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Системное моделирование химических процессов

Направление подготовки – 04.03.01 – Химия

Профиль подготовки

Уровень высшего образования: бакалавриат

Форма обучения – очная

Семестр	Трудоём- кость зач. ед. (час.)	Лекций, час.	Практич. занятий, час.	Лаборат. работ, час.	СРС, час.	Форма промежуточного контроля (экз./зачёт)
8	4 (144)	32	-	16	51	Экзамен (45)
Итого	4 (144)	32	-	16	51	Экзамен (45)

Владимир, 2015

ma

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями освоения дисциплины «Системное моделирование химических процессов» являются освоение студентами системного подхода к решению конкретных задач химической технологии моделирования и оптимизации химико-технологических процессов, обработки результатов эксперимента при изучении производственных процессов, используя при этом современные вычислительные средства высокого уровня. Акцент ставится на умение студентов не только использовать готовые вычислительные комплексы, но и самостоятельно составлять простейшие программы для этих целей.

Задачи курса. В результате изучения данного курса студент должен получить основные навыки системного подхода к моделированию и оптимизации химико-технологических процессов на основе изучения базовых математических методов – численного дифференцирования и численного интегрирования. Последние, в отличие от аналитических методов, позволяют производить эти операции практически во всех случаях, встречающихся в реальности. Многие задачи моделирования и оптимизации многофакторных химико-технологических процессов подразумевают использование этих средств и сводятся, в свою очередь, к ряду абстрактно сформулированных математических задач. В некоторых случаях для решения проблем математического моделирования процессов уже существуют готовые программные комплексы. Студенты должны иметь всеобъемлющее представление об основных методах моделирования и оптимизации и границах их применимости. Это позволит, во-первых, выбирать подходящую для решения конкретной задачи программу, во-вторых, правильно интерпретировать получаемые результаты. Профессионализм подготовки студентов по данной дисциплине будет обеспечен использованием конкретного языка высокого уровня – Pascal (в его современных реализациях – Delphi, Lazarus и т.д.). Это позволяет, в случае необходимости, в дальнейшем без труда освоить современные прикладные вычислительные системы – MathCad, MathLab и другие. Основной формой проведения занятий является выполнение студентами лабораторных занятий на компьютере.

Учитывая наличие специальных курсов «Численные методы в химии», «Математическое моделирование», в рамках данной дисциплины рассматриваются следующие категории численных методов: численное дифференцирование, численное интегрирование, одномерная оптимизация, многомерная оптимизация. Также проводится сравнительный анализ этих методов.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Дисциплина «Системное моделирование химических процессов» изучается в базовой части учебного плана.

Перечень дисциплин, необходимых для успешного изучения дисциплины «Системное моделирование химических процессов».

1. Математика.
2. Информатика.
3. Обработка результатов химического эксперимента.
4. Численные методы в химии.
5. Общая и неорганическая химия.
6. Аналитическая химия.
7. Физика (некоторые аспекты обработки эксперимента).

Освоение дисциплины «Системное моделирование химических процессов» необходимо как предшествующее для изучения следующих дисциплин:

1. Математическое моделирование.
2. Физическая химия.
3. Коллоидная химия.
4. Физико-химические методы анализа.
5. Химическая технология.

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

В процессе освоения данной дисциплины студент формирует и демонстрирует следующие компетенции:

- способность решать стандартные задачи профессиональной деятельности с использованием современных информационно-коммуникационных технологий с учётом основных требований информационной безопасности (ОПК-4).

В результате освоения данной дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:

1) Знать:

- Основы языка высокого уровня – DELPHI, – в той его части, которая необходима для математических вычислений (ОПК-4).
- Вспомогательные численные методы первичной обработки данных – численное дифференцирование, численное интегрирование химии, физической химии и химической технологии (ОПК-4).
- Математические методы решения прикладных задач моделирования и оптимизации процессов химической технологии (ОПК-4).

2) Уметь:

- Составлять программы на языке DELPHI для реализации решения задач моделирования и оптимизации химико-технологических процессов (ОПК-4).
- Применять навыки построения алгоритмов и составления программ для использования специальных математических пакетов, таких как MathCad, MathLab (ОПК-4).
- Разбираться в уже готовых компьютерных программах с целью их осмысленного применения, оптимизации или модернизации для решения близких задач химии (ОПК-4).

3) Владеть:

- Основными методами решения прикладных задач моделирования и оптимизации химико-технологических процессов и реализации их на компьютере (ОПК-4).
- Основными методами написания программ на языках высокого уровня (ОПК-4).
- Основами правильной постановки задач моделирования и оптимизации химико-технологических процессов и дальнейшей их реализации с целью получения математически обоснованных параметров производственных циклов (ОПК-4).

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Общая трудоёмкость дисциплины составляет 4 зачётных единиц, 144 часов.

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Вид учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах).						Объем учебной работы с применением интерактивных методов (в часах.%)	Формы контроля успеваемости (по неделям семестра). Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы.	Контрольные работы	СРС	КП/КР		
1	Численное дифференцирование. Использование в системном моделировании химико-технологических процессов	8	1-2	4		2		5		-	
2	Численное интегрирование. Использование в системном моделировании химико-технологических процессов	8	3-6	8		4		14		6/50	Рейтинг-контроль № 1
3	Одномерная оптимизация химико-технологических процессов.	8	7-10	6		3		14		4/44	Рейтинг-контроль № 2
4	Методы многомерной оптимизации. Метод покоординатного спуска.	8	11-14	8		4		12		4/33	
5	Методы многомерной оптимизации. Метод градиентного спуска.	8	15-18	6		3		6		4/44	Рейтинг-контроль № 3
	Всего			32		16		51		18/38	Экзамен (45)

СОДЕРЖАНИЕ КУРСА

Часть I. Численное дифференцирование

Численное дифференцирование. Суммарная погрешность и её составляющие: ошибка дискретизации (усечённая) и ошибка округления. Порядок точности. Способы уменьшения погрешности дифференцирования. Использование численного дифференцирования в системном моделировании и оптимизации химико-технологических процессов.

Часть II. Численное интегрирование

Приближённое вычисление определённых интегралов. Общая структура интерполяционно-квadrатурной формулы, способы выбора узлов и определение весов. Порядок точности. Формулы Ньютона-Котеса и Гаусса; их частные случаи: формулы прямоугольников, трапеций, Симпсона; Оценка погрешности результата. Алгоритм интегрирования с заданной степенью точности. Сплайн-квadrатура, её свойства, интегрирование таблично заданной функции.

Использование численного интегрирования в системном моделировании и оптимизации химико-технологических процессов.

Часть III. Методы одномерной оптимизации химико-технологических процессов

Постановка задачи оптимизации – нахождения наиболее оптимальных параметров проведения химико-технологических процессов. Сведение оптимизации к задаче поиска экстремальных значений функций одной и нескольких переменных.

Одномерная оптимизация. Метод золотого сечения. Задачи оптимизации работы теплообменных аппаратов.

Часть IV. Методы многомерной оптимизации химико-технологических процессов

Многомерная оптимизация. Метод покоординатного спуска. Метод градиентного спуска. Метод наискорейшего спуска. Метод сопряжённых градиентов.

Оптимальные условия проведения химических реакций. Реакторы идеального смешения. Реакторы идеального вытеснения.

Методы оптимизации с ограничениями и без ограничений.

Линейное программирование. Симплекс-метод. Нелинейное программирование.

ЛАБОРАТОРНЫЕ РАБОТЫ

1. Численное интегрирование. Метод трапеций.
2. Численное интегрирование Метод Симпсона
3. Одномерная оптимизация химико-технологических процессов.
4. Одномерная оптимизация химико-технологических процессов. Метод золотого сечения.
5. Защита лабораторных работ. Рейтинг-контроль № 2.
6. Метод покоординатного спуска.
7. Метод покоординатного спуска (продолжение).
8. Метод градиентного спуска.
9. Метод градиентного спуска (продолжение).
10. Защита лабораторных работ. Рейтинг-контроль № 2 (итоговый).

5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Изложение теоретического материала осуществляется с применением электронных средств обучения.

Некоторые разделы теоретического курса рассматриваются с использованием опережающей самостоятельной работы: студенты получают задание на изучение нового материала до его изложения на лекции.

Используются активные и интерактивные формы обучения: компьютерные симуляции вычислительных алгоритмов, разбор конкретных примеров для рассматриваемых алгоритмов. При чтении лекций могут применяться экспромтные психологические этюды.

Для оценки освоения теоретического материала студентами используются письменные контрольные работы и устный опрос.

6. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ И УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ.

Задания к рейтинг-контролю:

Рейтинг-контроль №1

1. Определить обобщённую степень числа.
2. Как получаются формулы приближенного дифференцирования?
3. Задача численного дифференцирования является некорректной - что это означает?
4. Суть численного интегрирования.
5. Как получаются квадратурные формулы Ньютона - Котеса?
6. Как меняется вычислительный алгоритм при изменении кратности интеграла для классических квадратурных формул и для метода Монте-Карло?
7. К какому типу методов - прямых или итерационных, относится метод главных элементов?
8. Каким образом получается эмпирическая формула?
9. Цель статистической обработки. Что значит детерминированный алгоритм?
10. Геометрический смысл определённого интеграла.
11. Общая идея методов численного интегрирования.
12. Методы левых, правых, средних прямоугольников (формулы, геометрическая иллюстрация, оценка погрешности).
13. Метод трапеций (формула, геометрическая иллюстрация, оценка погрешности).
14. Метод Симпсона (формула, геометрическая иллюстрация, оценка погрешности).

Рейтинг-контроль №2

1. Правило Рунге.
2. Сравнительная оценка методов численного интегрирования.
3. Что такое оптимизация?
4. Что понимается под количественной оценкой оптимизируемого качества?
5. Какие типы задач оптимизации существуют?
6. В чем состоит безусловная задача оптимизации?
7. В чем состоит условная задача оптимизации?

Рейтинг-контроль №3

1. В каком случае используется одномерная оптимизация?
2. В чем состоит основная задача одномерной оптимизации?
3. Дайте сравнительную характеристику методов одномерной оптимизации.
4. Метод сканирования.
5. Метод локализации.
6. Метод золотого сечения.
7. Метод поиска с использованием чисел Фибоначчи/
8. Методы многомерной оптимизации. Метод покоординатного спуска.
9. Методы многомерной оптимизации. Метод градиентного спуска.

Основные тематические направления для самостоятельной работы студентов:

Преподаватель должен ориентировать студентов на то, чтобы они учились оценивать полученные результаты. Ему необходимо обращать особое внимание на то, как студенты записывают результаты в тетрадь с монитора компьютера. Они должны записывать только верные цифры. Для этого следует преподавателю объяснять студентам о необходимости осмыслить результат, убедиться, что задача решена правильно. Он должен обратить внимание студентов на то, что при компиляции программы на языке Паскаль, выдаются сообщения о синтаксических ошибках в тексте программы, запуск программы на вычисление невозможен без исправления этих ошибок. Поэтому после прохождения компиляции у студентов может возникнуть иллюзия, что всё вычисляется верно, но это не всегда так. Преподаватель должен предложить студентам самостоятельно дополнить программу или выполнить какие-то действия с тем, чтобы они убедились, что программа выдаёт правильный результат. В каждом конкретном методе будут даны указания, что нужно делать для контроля результата.

Численное дифференцирование и интегрирование. При изучении численного дифференцирования обратить внимание студентов на то, что данная задача является некорректной. Решение этой задачи опирается на интерполирование, в котором мера близости приближающей функции – это совпадение в узлах с исходной функцией. Действительно, близость друг к другу ординат двух кривых и ещё не гарантирует близости на этом отрезке их производных и , т.е. малого расхождения угловых коэффициентов касательных к рассматриваемым кривым при одинаковых значениях аргумента. При изучении численного интегрирования обратить внимание студентов, что вывод квадратурных формул изложен в общем виде, для произвольного n , а затем приведены их частные случаи. Студенты вычисляют интеграл по разным квадратурным формулам, выполняют, так называемый вычислительный эксперимент, и определяют какая из формул более

точная при равных условиях. Дополнительно в этой теме студенты могут научиться вычислять коэффициенты Котеса при различных значениях n .

Решение систем линейных алгебраических уравнений. При решении систем линейных алгебраических уравнений, число неизвестных может достигать нескольких десятков, сотен и даже тысяч. Преподавателю следует обратить внимание студентов на то, что необходимо учитывать не только время, требуемое для проведения большого количества арифметических операций в каком – либо методе, но и на то, что происходит накопление ошибок округления появляющихся в результате большого числа операций - это является очень серьёзной проблемой. Обратить внимание студентов на то, что математическое изложение метода главных элементов достаточно простое, но реализация этого метода на алгоритмическом языке для компьютера весьма сложная задача. Поэтому, чтобы уменьшить вычислительную погрешность им, необходимо использовать метод Гаусса с выбором главных элементов. Дополнительно при вычислении обратной матрицы, студенты должны уметь расписать компактную формулу в развёрнутом виде. Таким образом, они представят общий объём вычислений - это решение систем уравнений относительно неизвестных.

Оптимизация. Преподаватель должен обратить внимание студентов на сведение конкретных задач оптимизации технологических процессов в химии к чисто математическим задачам поиска экстремумов функций. Описание многофакторных химико-технологических процессов функциями нескольких переменных. В соответствии с этим преподаватель предлагает студентам задания по одномерной и многомерной оптимизации. Вспомогательная роль одномерной оптимизации. Преподаватель обращает внимание студентов на важность правильного подбора того или иного метода многомерной оптимизации для решения конкретных задач, имеющих свои особенности.

Вопросы для самостоятельной работы студентов:

1. В чем состоит общая задача нелинейного программирования?
2. На какие группы делятся методы решения задач безусловной минимизации?
3. Дайте краткую характеристику методов безусловной минимизации: итерационный характер методов; проблема выбора шага; выбор направления поиска.
4. Опишите алгоритм метода покоординатного спуска.
5. Как выбирается направление спуска в методе покоординатного спуска?
6. При выполнении какого условия следует прекратить поиск?
7. Составьте блок-схему метода покоординатного спуска.
8. Дайте сравнительную характеристику градиентных методов оптимизации.
9. Дайте описание алгоритма метода наискорейшего спуска.

10. Как решается проблема выбора шага и направления в методе наискорейшего спуска?
11. Дайте описание алгоритма метода сопряженных направлений.
12. В чем состоит основное отличие методов наискорейшего спуска и сопряженных направлений?
13. Какие методы условной минимизации вы знаете?
14. В чем главное отличие методов условной минимизации от методов безусловной минимизации?
15. Метод сканирования.
16. Каково минимальное количество вычислений целевой функции для метода сканирования?
17. Укажите область использования метода сканирования.
18. Метод штрафных функций.
19. На какие классы можно разделить методы штрафных функций?
20. Чем характеризуются параметрические методы?
21. Многомерный поиск. Линейное программирование.

Экзаменационные вопросы

1. Методы численного дифференцирования.
2. Формулы приближенного дифференцирования.
3. Геометрический смысл определённого интеграла.
4. Численное интегрирование. Методы прямоугольников и трапеций.
5. Численное интегрирование. Метод Симпсона.
6. Оптимизация химико-технологических процессов.
7. Одномерная оптимизация методом золотого сечения.
8. Многомерная оптимизация методом покоординатного спуска.
9. Многомерная оптимизация методом градиентного спуска.
10. Геометрический смысл определённого интеграла.
11. Общая идея методов численного интегрирования.
12. Методы левых, правых, средних прямоугольников (формулы, геометрическая иллюстрация, оценка погрешности).
13. Метод трапеций (формула, геометрическая иллюстрация, оценка погрешности).
14. Метод Симпсона (формула, геометрическая иллюстрация, оценка погрешности).
15. Правило Рунге.
16. Сравнительная оценка методов численного интегрирования.

17. Типы задач оптимизации существуют. Безусловная задача оптимизации. Условная задача оптимизации.
18. Сравнительная характеристика градиентных методов оптимизации.
19. Описание алгоритма метода наискорейшего спуска.
20. Многомерный поиск. Линейное программирование.

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Основная литература:

1. Тарасик В.П. Математическое моделирование технических систем. Изд.: Новое знание, 2013
http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=4324.
2. Р. Темам, А. Миранвиль. Математическое моделирование в механике сплошных сред. Пер. с англ. 2-е изд. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014
<http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996323128.html>.
3. А.Л. Королёв. Компьютерное моделирование. Лабораторный практикум. 2-е изд. (эл.). М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013. <http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996322558.html>.

Дополнительная литература:

1. Ас. М. Гумеров, Н. Н. Валеев, Аз. М. Гумеров, В. М. Емельянов. Математическое моделирование химико-технологических процессов. М.: КолосС. 2008.
<http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785953206310.html>.
2. Маликов Р.Ф. Основы математического моделирования. Изд.: Горячая линия-Телеком. 2010.
http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=5169.
3. Саваторова В.Л., Белый А.А. - М. Математическое моделирование процессов кондуктивной теплопередачи в гетерогенных средах с периодической структурой: Отдельные статьи Горного информационно-аналитического бюллетеня (научно-технического журнала): Горная книга. 2010. <http://www.studentlibrary.ru/book/0236-1493.html>

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы.

1. Язык программирования Pascal.
2. Интегрированная среда разработки программ Borland Delphi.
3. <http://www.y10k.ru/books/> 4. <http://www.abc.chemistry.bsu.by/current/fulltext.htm>
5. <http://www.sciencedirect.com>
6. <http://chemteq.ru/lib/book>
7. <http://www.chem.msu.su/rus>

8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)


При чтении лекционного курса используются мультимедийные средства обучения в виде набора слайдов с демонстрацией через проектор.

На лабораторных занятиях используются компьютеры и соответствующее программное обеспечение.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки – 04.03.01 – “Химия” (бакалавриат)


Рабочую программу составил доцент Лобко В.Н.

Рецензент

 Научный сотрудник ООО “БМТ”
Третьяков А.В.


Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химии

Протокол № 7/1 от 14.04. 2015 г.

Заведующий кафедрой 

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании учебно-методической комиссии направления 04.03.01 – “Химия”

Протокол № 7/1 от 16.04. 2015 г.

Председатель комиссии 

Программа переутверждена:

на 2015/2016 учебный год. Протокол заседания кафедры № 1 от 31.08.15 года

Зав. кафедрой 

на 2016/2017 учебный год. Протокол заседания кафедры № 1/1 от 5.09.16 года

Зав. кафедрой 

на _____ учебный год. Протокол заседания кафедры № __ от _____ года

Зав. кафедрой _____

на _____ учебный год. Протокол заседания кафедры № __ от _____ года

Зав. кафедрой _____

на _____ учебный год. Протокол заседания кафедры № __ от _____ года

Зав. кафедрой _____