

2019

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



УТВЕРЖДАЮ
 Проректор
 по образовательной деятельности
 _____ И.А. Панфилов

« 03 » 09 2019 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
СИСТЕМНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Направление подготовки – 04.03.01 – Химия

Профиль/программа подготовки – Химический анализ, химическая и экологическая экспертиза объектов окружающей среды

Уровень высшего образования: бакалавриат

Форма обучения – очная

Семестр	Трудоемкость зач. ед./ час.	Лекции, час.	Практич. занятия, час.	Лаборат. работы, час.	СРС, час.	Форма промежуточной аттестации (экзамен/зачет/зачет с оценкой)
7	4/144	36		18	90	Зачёт с оценкой
Итого	4/144	36		18	90	Зачёт с оценкой

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Цель освоения дисциплины «Системное моделирование химических процессов»: 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: 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.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

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

Пререквизиты 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).

3. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения ОПОП

Код формируемых компетенций	Уровень освоения компетенции ¹	Планируемые результаты обучения по дисциплине характеризующие этапы формирования компетенций (показатели освоения компетенции)
1	2	3
ОПК-5, ПК-5	частичное	<p><i>Знать:</i> вспомогательные численные методы первичной обработки данных – численное дифференцирование, численное интегрирование химии, физической химии и химической технологии, математические методы решения прикладных задач моделирования и оптимизации процессов химической технологии.</p> <p><i>Уметь:</i> составлять программы на языке DELPHI для реализации решения задач моделирования и оптимизации химико-технологических процессов, применять навыки построения алгоритмов и составления программ для использования специальных математических пакетов, таких как MathCad, MatLab, разбираться в уже готовых компьютерных программах с целью их осмысленного применения, оптимизации или модернизации для решения близких задач химии.</p> <p><i>Владеть:</i> основными методами решения прикладных задач моделирования и оптимизации химико-технологических процессов и реализации их на компьютере, основными методами написания программ на языках высокого уровня, основами правильной постановки задач моделирования и оптимизации химико-технологических процессов и дальнейшей их реализации с целью получения математически обоснованных параметров производственных циклов.</p>

4. ОБЪЕМ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Трудоёмкость дисциплины составляет 4 зачётных единиц, 144 часов.

№ п/п	Наименование тем и/или разделов/тем 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 текущего контроля, форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы.	СРС		
1	Численное дифференцирование. Использование в системном моделировании химико-технологических процессов.	7	1-2	4		2	16		
2	Численное интегрирование. Использование в системном моделировании химико-технологических процессов.	7	3-6	8		4	20	6/50	Рейтинг-контроль № 1
3	Одномерная оптимизация химико-технологических процессов.	7	7-10	6		3	20	4/44,5	Рейтинг-контроль. № 2
4	Методы многомерной оптимизации. Метод покоординатного спуска.	7	10-14	10		5	22	5/33	
5	Методы многомерной оптимизации. Метод градиентного спуска.	7	15-18	8		4	12	6/50	Рейтинг-контроль № 3
Всего за 5 семестр:				36		18	90	21/39	Экзамен (36)
Наличие в дисциплине КП/КР									
Итого по дисциплине				36		36	90	21/39	Экзамен (36)

Содержание лекционных занятий по дисциплине

Раздел I. Численное дифференцирование и интегрирование

Тема 1. Численное дифференцирование

Содержание темы. 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.

Тема 2. Численное интегрирование

Содержание темы. Приближённое вычисление определённых интегралов. Общая структура интерполяционной квадратурной 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-квадратура, её свойства, интегрирование таблично заданной функции.

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

Раздел II. Методы одномерной оптимизации химико-технологических процессов

Тема 3. Задача оптимизации

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

Тема 4. Одномерная оптимизация

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

Раздел III. Методы многомерной оптимизации химико-технологических процессов

Тема 5. Многомерная оптимизация

Содержание темы. 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.

Тема 6. Оптимизация с ограничениями

Содержание темы. Методы оптимизации с ограничениями и без ограничений. Линейное программирование. Симплекс-метод. Нелинейное программирование.

Содержание лабораторных занятий по дисциплине

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 № 1.
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

В преподавании дисциплины «Системное моделирование химических процессов» используются разнообразные образовательные технологии как традиционные, так и с применением активных и интерактивных методов обучения.

Активные и интерактивные методы обучения:

- *Интерактивная лекция (тема № 3, 5);*
- *Групповая дискуссия (тема № 3);*
- *Тренинг (тема № 2);*
- *Анализ ситуаций (тема № 3, 5);*
- *Применение имитационных моделей (тема № 5, 6);*
- *Разбор конкретных ситуаций (тема № 5, 6).*

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

Текущий контроль успеваемости приводится по результатам рейтинг-контроля по следующим контрольным вопросам:

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.

Промежуточная аттестация по итогам освоения дисциплины.

Вопросы к зачёту с оценкой

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.

Учебно-методическое обеспечение 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.

Для успешного выполнения самостоятельной работы студентам рекомендуется следующая литература:

Н. С. Бахвалов, Н. П. Жидков, Г. М. Кобельков. Численные методы. 8-е изд. (эл.). М.: БИНОМ. Лаборатория знаний. 2015.

Фонд оценочных средств для проведения аттестации уровня сформированности компетенций обучающихся по дисциплине оформляется отдельным документом.

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

7.1. Книгообеспеченность

Наименование литературы: автор, название, вид издания, издательство	Год издания	КНИГООБЕСПЕЧЕННОСТЬ	
		Количество экземпляров изданий в библиотеке ВлГУ в соответствии с ФГОС ВО	Наличие в электронной библиотеке ВлГУ
1	2	3	4
Основная литература*			
1. Тарасик В.П. Математическое моделирование технических систем. Изд.: Новое знание. 2013.	2013	1	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.	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.	2013	2	http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785996322558.html
4. В. Н. Лобко. Математические методы в химии и химической технологии. Основы программирования вычислительных задач. Учебное пособие. Владимир 2018	2018	10	http://e.lib.vlsu.ru:80/handle/123456789/7426
Дополнительная литература			
1. Ас. М. Гумеров, Н. Н. Валеев, Аз. М. Гумеров, В. М. Емельянов. Математическое моделирование химико-технологических процессов. М.: КолосС. 2008.	2008	1	http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785953206310.html
2. Маликов Р.Ф. Основы математического моделирования. Изд.: Горячая линия-Телеком. 2010.	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.	2010		http://www.studentlibrary.ru/book/0236-1493.html

7.2. Периодические издания:

1, Информатика и программирование.

7.3. 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

Для реализации данной дисциплины имеются специальные помещения для проведения занятий лекционного типа, занятий лабораторного типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации. Лабораторные работы проводятся в лаборатории 422-2, 423-2.

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

Перечень используемого лицензионного программного обеспечения: Windows 10, Lazarus, Microsoft Office 2010, Power Point, Adobe Reader,

Рабочую программу составил доцент Лобко В.Н.

Рецензент
(представитель работодателя)

АО «РМ НАНОТЕХ», начальник аналитического отдела центральной заводской лаборатории
к.х.н.

А.В. Третьяков

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химии

Протокол № 1 от 03.09 2019 г.

Заведующий кафедрой

Б.А.Кухтин

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании учебно-методической комиссии
направления 04.03.01 – «Химия»

Протокол № 1 от 03.09 2019 г.

Председатель комиссии

Б.А.Кухтин

**ЛИСТ ПЕРЕУТВЕРЖДЕНИЯ
РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ**

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____

Рабочая программа одобрена на _____ учебный год

Протокол заседания кафедры № _____ от _____ года

Заведующий кафедрой _____

ЛИСТ РЕГИСТРАЦИИ ИЗМЕНЕНИЙ

в рабочую программу дисциплины

НАИМЕНОВАНИЕ

образовательной программы направления подготовки код и наименование ОП, направленность:
наименование (указать уровень подготовки)

Номер изменения	Внесены изменения в части/разделы рабочей программы	Исполнитель ФИО	Основание (номер и дата протокола заседания кафедры)
1			
2			

Зав. кафедрой _____ / _____
Подпись *ФИО*