

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)

Институт биологии и экологии

УТВЕРЖДАЮ:

Директор института
Смирнова Н.Н.
2021 г.



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
СИСТЕМНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

направление подготовки / специальность

04.03.01 – Химия

направленность (профиль) подготовки

Химический анализ, химическая и экологическая экспертиза объектов
окружающей среды

г. Владимир

2021



1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью 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

Дисциплина «Системное моделирование химических процессов» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений.

3. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения ОПОП (компетенциями и индикаторами достижения компетенций)

Формируемые компетенции (код, содержание компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине, в соответствии с индикатором достижения компетенции		Наименование оценочного средства
	Индикатор достижения компетенции (код, содержание индикатора)	Результаты обучения по дисциплине	
<p>ПК-5 Способен применять информационные технологии и специализированные программы для обработки полученных данных</p>	<p>ПК-5.1. Знает методы проведения сравнительного анализа, исследований и экспериментальных работ. ПК-5.2. Умеет работать со сложным исследовательским, лабораторным оборудованием и средствами измерений; Формулировать выводы и рекомендации по результатам исследования. ПК-5.3 Владеет методами и средствами математической обработки и обобщения результатов исследований на основе статистических данных.</p>	<p>Знает: 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. Умеет: 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 Владеет: основными методами решения прикладных задач моделирования и</p>	<p>тесты, вопросы</p>

		<p>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

Трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных единиц, 72 часа.

Тематический план форма обучения – очная

№ п/п	Наименование тем и/или разделов/тем дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Контактная работа обучающихся с педагогическим работником				Самостоятельная работа	Формы текущего контроля, форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы.	В форме практической подготовки		
1	Численное дифференцирование. Использование в системном моделировании химико-технологических процессов.	7	1-2	4		2		2	
2	Численное интегрирование. Использование в системном моделировании химико-технологических процессов.	7	3-6	8		4		2	Рейтинг-контроль № 1
3	Одномерная оптимизация химико-технологических процессов.	7	7-10	6		3		2	Рейтинг-контроль. № 2
4	Методы многомерной оптимизации. Метод покоординатного спуска.	7	10-14	10		5		8	
5	Методы многомерной оптимизации. Метод градиентного спуска.	7	15-18	8		4		4	Рейтинг-контроль № 3
Всего за 7 семестр:				36		18		18	Зачёт с оценкой
Наличие в дисциплине КП/КР									
Итого по дисциплине				36		18		18	Зачёт с оценкой

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

5.1. Текущий контроль успеваемости

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.

5.2. 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.

5.3. Самостоятельная работа обучающегося.

Вопросы для самопроверки

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.

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

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1. Книгообеспеченность

Наименование литературы: автор, название, вид издания, издательство	Год издания	КНИГООБЕСПЕЧЕННОСТЬ
		Наличие в электронной библиотеке ВлГУ
1	2	3
Основная литература*		
1. В. Н. Лобко. Математические методы в химии и химической технологии. Основы программирования вычислительных задач. Учебное пособие. Владимир: Изд-во ВлГУ. 2018.	2018	http://e.lib.vlsu.ru:80/handle/123456789/7426
2. В. Н. Лобко. Математические методы в химии и химической технологии. Численные методы решения алгебраических задач и обработки функций. Учебное пособие. Владимир: Изд-во ВлГУ, 2019.	2019	http://e.lib.vlsu.ru:80/handle/123456789/8267
3. Р.Г. Сафин, А.И. Иванов, Н.Ф. Тимербаев. Основы научных исследований. Организация и планирование эксперимента : учебное пособие. Казан. нац. исслед. технол. ун-т. –Казань : Изд-во КНИТУ. 2013.	2013	http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785788214122.html
4. Ф.И. Карманов, В.А. Острейковский. Статистические методы обработки экспериментальных данных. Лабораторный практикум с использованием пакета MathCad: Учеб. Пособие. М.: Абрис, 2012.	2012	http://www.studentlibrary.ru/book/ISBN9785437200599.html
Дополнительная литература		
1. В.П. Осипов. Практикум по программированию на языке DELPHI : в 2 ч. Ч. 1 : Структурное программирование : учеб. Пособие. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2010...	2010	http://www.studentlibrary.ru/book/bauman_0359.html

6.2. Периодические издания

1. Программирование (журнал).

6.3. 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>

7. 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)

ООО «БИОХИМПРЕСУРС», научный сотрудник
к.х.н.



Д.К. Лаврухин

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры химии

Протокол № 10 от 25.06 2021 г.

Заведующий кафедрой



Б.А. Кухтин

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

Протокол № 10 от 25.06. 2021 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

«Системное моделирование химических процессов» образовательной программы направления подготовки 04.03.01 – Химия, направленность: Химический анализ, химическая и экологическая экспертиза объектов окружающей среды

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

Зав. кафедрой _____ / _____
Подпись *ФИО*