

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович  
Должность: Проректор по учебной и методической работе  
Дата подписания: 12.09.2021 19:10:28  
Уникальный программный ключ:  
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт  
(технический университет)»

УТВЕРЖДАЮ  
Проректор по учебной  
и методической работе  
\_\_\_\_\_ Б.В.Пекаревский  
« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2016 г.

**Рабочая программа дисциплины  
КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
В ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ**

Направление подготовки

**09.03.01 Информатика и вычислительная техника**

Направленность программы бакалавриата

**Автоматизированные системы обработки информации и управления**

Квалификация

**Бакалавр**

Форма обучения

**Заочная**

Факультет **информационных технологий и управления**

Кафедра **систем автоматизированного проектирования и управления**

Санкт-Петербург

2016

## ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность	Подпись	Ученое звание, фамилия, инициалы
Разработчики		доцент Л.В.Гольцева
		А.В. Козлов

Рабочая программа дисциплины «Компьютерное моделирование в химии и химической технологии» обсуждена на заседании кафедры систем автоматизированного проектирования и управления  
протокол от «13» апреля 2016 № 7  
Заведующий кафедрой

Т.Б.Чистякова

Одобрено учебно-методической комиссией факультета информационных технологий и управления  
протокол от «15» апреля 2016 № 7  
Председатель

В.В.Куркина

## СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления подготовки «Информатика и вычислительная техника»		профессор Т.Б. Чистякова
Директор библиотеки		Т.Н.Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		Т.И.Богданова
Начальник УМУ		С.Н.Денисенко

## СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы .....	4
2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы .....	5
3. Объем дисциплины .....	5
4. Содержание дисциплины	
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий .....	6
4.2. Занятия лекционного типа .....	7
4.3. Занятия семинарского типа .....	8
4.3.1. Семинары, практические занятия .....	8
4.3.2. Лабораторные занятия .....	9
4.4. Самостоятельная работа .....	9
4.4.1 Темы контрольных работ .....	9
4.4.2 Тестирование .....	10
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине .....	13
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации .....	13
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины .....	13
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины .....	14
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины .....	14
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	
10.1. Информационные технологии .....	14
10.2. Программное обеспечение .....	15
10.3. Информационные справочные системы .....	15
11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине .....	16
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья .....	16
Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации .....	17

**1.Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.**

В результате освоения образовательной программы бакалавриата обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

<i>Коды компетенции</i>	Результаты освоения ООП (содержание компетенций)	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
<b>ОПК-2</b>	способность осваивать методики использования программных средств для решения практических задач	<p><b>Знать:</b> Физико-химические закономерности технологических процессов и явлений (законы описания явлений гидродинамики, химических реакций, теплообмена, массообмена).</p> <p><b>Уметь:</b> Применять основные физико-химические законы для анализа технологических процессов с целью выявления основных модулей- движения потоков в аппаратах, химических реакций, явлений переноса.</p> <p><b>Владеть:</b> Навыками составления уравнений материального и теплового баланса.</p>
<b>ПК-2</b>	способность разрабатывать компоненты аппаратно-программных комплексов и баз данных, используя современные инструментальные средства и технологии программирования	<p><b>Знать:</b> Основные виды математических моделей химико-технологических процессов (ММ ХТП), этапы разработки ММ, модульный подход к синтезу ММ;</p> <p><b>Уметь:</b> Разрабатывать алгоритмы решения прикладных задач; Использовать пакеты прикладных программ для анализа и синтеза ММ ХТП.</p> <p><b>Владеть:</b> Методикой оценки разработанного программного обеспечения.</p>
<b>ПК-3</b>	способность обосновывать принимаемые проектные решения, осуществлять постановку и выполнять эксперименты по проверке их корректности и эффективности	<p><b>Знать:</b> Принципы разработки программных продуктов.</p> <p><b>Уметь:</b> Разрабатывать на основе алгоритмов программное обеспечение для анализа ХТП.</p>

<i>Коды компетенции</i>	Результаты освоения ООП (содержание компетенций)	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
		<b>Владеть:</b> навыками использования при решении поставленных задач программных пакетов для ЭВМ.

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина относится к обязательным дисциплинам вариативной части (Б1.В.ОД.21) и изучается на 4 курсе в 8 семестре и на 5 курсе в 9 семестре.

В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин: «Алгебра и геометрия», «Математический анализ», «Физика», «Химия», «Математическая логика и теория алгоритмов», «Информатика», «Программирование», «Процессы и аппараты химических производств».

Полученные в процессе изучения дисциплины «Компьютерное моделирование в химии и химической технологии» знания, умения и навыки могут быть использованы при изучении учебных дисциплин «Математическое моделирование химико-технологических объектов с распределенными параметрами», «Основы разработки автоматизированных информационных систем», при подготовке, выполнении и защите курсовых работ по специальности, выпускной квалификационной работы и при решении задач в будущей профессиональной деятельности.

## 3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, академических часов
	Очная форма обучения
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b> (зачетных единиц/ академических часов)	3 /108
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	<b>12</b>
занятия лекционного типа	4
занятия семинарского типа, в т.ч.	
семинары, практические занятия	4
лабораторные работы	4
курсовое проектирование (КР или КП)	КР
КСР	4
другие виды контактной работы	-
<b>Самостоятельная работа</b>	<b>92</b>
<b>Форма текущего контроля</b> (Кр, реферат, РГР, эссе)	-
<b>Форма промежуточной аттестации</b> (КР, КП , зачет, экзамен)	курсовая работа, зачёт

#### 4. Содержание дисциплины.

##### 4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, акад. часы	Занятия семинарского типа, акад. часы		Самостоятельная работа, акад. часы	Формируемые компетенции
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы		
1	Принципы компьютерного моделирования химических процессов и применение ММ в автоматизированных системах.	0,5	0,5	-	1	ОПК-2
2	Гидродинамические модели структуры потоков в аппаратах	1	1	1	3	ОПК-2, ПК-2
3	Математическое описание химических реакций	1	1	1	3	ОПК-2, ПК-2, ПК-3
4	ММ реакторов с учетом переноса тепла	1	1	1	3	ОПК-2, ПК-2, ПК-3
5	Эмпирические и имитационные модели процессов	0,5	0,5	1	2	ОПК-2, ПК-2, ПК-3
Всего на дисциплину		4	4	4	12	

##### 4.2. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Иновационная форма
1	<u>Принципы компьютерного моделирования химических процессов</u> Особенности моделирования ХТП; применение ММ ХТП в автоматизированных системах; классификация ММ; структурные и функциональные модели, принципы построения ММ; требования к ММ; основные уравнения детерминированной ММ.	0.5	Слайд-презентация

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Иновационная форма
2	<u>Гидродинамические модели структуры потоков в аппаратах.</u> Методы изучения структуры потоков в аппаратах; типовые воздействия; методы описания типовых моделей гидродинамики; ММ идеального смешения, вытеснения, диффузионная, ячеечная, комбинированные;	1	Слайд-презентация;
3	<u>Математическое описание химических реакций.</u> Классификация химических реакций, Прямая задачи кинетики; структурно-параметрический синтез ММ кинетики. Описание стехиометрии, кинетики, порядка и молекулярности реакций, зависимости от температуры и влияния катализатора. Построение ММ кинетики для реакторов непрерывного и периодического действия в режимах статики и динамики.	1	Слайд-презентация;
4	<u>ММ реакторов с учетом переноса тепла.</u> Виды процессов теплообмена; теплообмен как сложная система. Тепловые режимы реакторов; построение математической модели политропического реактора типа смешение-смешение Математические модели теплообменных аппаратов. Моделирование теплообменных аппаратов типа смешение-смешение; смешение-вытеснение; вытеснение-вытеснение; алгоритмы расчета распределения температуры при прямоточном течении в кожухотрубчатом аппарате.	1	Слайд-презентация; Демонстрация программных продуктов.
5	<u>Эмпирические и имитационные модели процессов.</u> Эмпирические модели в составе ММ сложных химико-технологических процессов. Методы планирования эксперимента. Способы получения регрессионных моделей для описания свойств веществ, кинетических и теплофизических констант.	0.5	Слайд-презентация

### 4.3. Занятия семинарского типа.

#### 4.3.1. Семинары, практические занятия.

№ Раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Иновационная форма
2,3	Изучение алгоритмов решения динамических ММ методами Эйлера и Рунге-Кутты решения обыкновенных дифференциальных уравнений для решения задачи кинетики и теплообмена. Сравнительный анализ результатов моделирования.	2	-

№ Раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1-5	Общая постановка задачи выполнения курсовой работы. Анализ структуры работы и содержания разделов. Контроль выполнения разделов работы. Разработка нормативного документа для оформления программной документации (описание применения,)	2	Слайд-презентация, групповая дискуссия

#### 4.3.2. Лабораторные занятия.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Примечание
2, 3	Разработка программного обеспечения решения обыкновенных дифференциальных уравнений методами Эйлера и Рунге-Кутты	1	
2-5	Разработка программного обеспечения для решения динамической ММ типового процесса Анализ результатов моделирования.	1	
3, 4, 5	Разработка программного обеспечения для решения ММ, использующей численные методы решения ОДУ. Например, аппарата идеального смешения или идеального смешения с проскоком или застойной зоной с заданным механизмом реакций и учитывающей теплообмен с окружающей средой. Разработка интерфейса пользователя для ввода исходных данных и вывода результатов в виде таблиц и графиков.	1	
4	Разработка программного обеспечения для решения ММ теплообменного аппарата при различных режимах течения потоков.	0,5	
5	Построение эмпирических моделей экспериментально-статистическими методами, например описание физико-химических свойств веществ, определение кинетических констант химических реакций, параметров гидродинамических моделей.	0,5	



#### 4.4. Самостоятельная работа обучающихся.

№ раздела дисциплины	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем, акад. часы	Форма контроля
1	Принципы компьютерного моделирования химических процессов и применение ММ в автоматизированных системах.	12	Формирование задания на курсовую работу
2	Изучение метода Ньютона - Рафсона для решения статической ММ и разработка алгоритма решения	10	Письменный опрос
1	Изучение методов моделирования гетерогенных систем. Изучение моделей массообменных процессов на примере процессов абсорбции, адсорбции, сушки дисперсных материалов.	20	
2-5	Разработка алгоритмов решения ММ численными методами по темам лабораторных и курсовых работ.	30	Опрос по разделам курсовой работы
2-5	Разработка интерфейсов программных продуктов – ММ аппарата идеального смешения и программного комплекса, разрабатываемого в рамках выполнения курсовой работы	20	Контроль выполнения разделов курсовой работы

##### 4.4.1 Темы контрольных работ

Студент выполняет 3 контрольные работы.

##### **Контрольная работа № 1.**

Контрольная работа включает два задания:

- разработка модели гидродинамики потоков как основы математической модели химико-технологических процессов;
- разработка математической модели кинетики химических реакций на основании заданного механизма.

##### **КОНТРОЛЬНАЯ РАБОТА №2.**

Контрольная работа включает два задания:

- разработка математических моделей процесса теплообмена в теплообменных аппаратах и исследование влияние характеристик процесса на выходные переменные.
- определение коэффициентов эмпирических уравнений для расчета физико-химических и теплофизических констант, либо выходных характеристик процесса в программных средах.

##### **КОНТРОЛЬНАЯ РАБОТА №3.**

Контрольная работа включает одно задание:

- разработка статической математической модели процесса выпаривания в выпарном аппарате и получение статических характеристик по различным каналам управления.

#### 4.4.2 Тестирование

Примеры тестовых заданий:

№	Задание	Варианты ответа
1	По целевому назначению математические модели могут быть:	для исследования, проектирования, управления
		структурные и функциональные
		теоретические и эмпирические
2	Для какого типа моделей требуется задание начальных и граничных условий?	Идеального смешения
		Идеального вытеснения
		Ячеечная модель
3	Укажите уравнение материального баланса для аппарата, описываемого моделью идеального смешения	$\frac{dC(t)}{dt} = \frac{1}{\bar{\tau}}(C_{ex}(t) - C(t))$
		$\frac{\partial C(t,l)}{\partial t} = -u \frac{\partial C(t,l)}{\partial l}$
		$\bar{\tau}_i \frac{dC_i(t)}{dt} = C_{i-1}(t) - C_i(t), i = 1, 2, \dots, n.$
4	Требования к математическим моделям:	Простота, точность адекватность, экономичность
		Универсальность, точность адекватность, экономичность
		Универсальность, линейность, адекватность, экономичность
5	В реакторе протекает реакция $A+B=2C$ с константой скорости $k$ . Скорость данной реакции $w_r$ описывается уравнением:	$w_r = k \cdot C_C^2$
		$w_r = 2 \cdot k \cdot C_A C_B$
		$w_r = k \cdot C_A C_B$ ;
6	В закрытом реакторе идеального смешения протекают 2 параллельные реакции, механизм которых: $A_1 + 2A_2 = A_3$ $A_4 + A_2 = A_5 + A_1$ Скорости реакций равны $w_{r_1}$ и $w_{r_2}$ соответственно. Скорость изменения концентрации компонента $A_1$ определяется:	$\frac{dC_{A_1}}{dt} = w_{r_1} - w_{r_2}$
		$\frac{dC_{A_1}}{dt} = -w_{r_1} - w_{r_2}$
		$\frac{dC_{A_1}}{dt} = -w_{r_1} + w_{r_2}$

№	Задание	Варианты ответа
7	Политропический режим работы реактора – режим, при котором:	температура в реакторе непостоянна, при этом часть тепла может идти на разогрев реакционной смеси, а часть - на теплообмен с окружающей средой.
		путем подвода или отвода тепла в реакторе поддерживают постоянную температуру в течение всего процесса.
		в реакторе отсутствует теплообмен с окружающей средой и тепло химической реакции полностью расходуется на изменение температуры реакционной смеси.
8	Основное уравнение теплопередачи, где $K$ – коэффициент теплопередачи, $Q$ – тепловой поток (расход передаваемой теплоты), $Вт$ ; $F$ – площадь поверхности теплопередачи, $м^2$ ; $\Delta t_{cp}$ - средняя разность температур горячего и холодного теплоносителя, $К$ .	$Q = K \cdot F \cdot \Delta t_{cp}$
		$Q = K \cdot F / \Delta t_{cp}$
		$Q = K / F \cdot \Delta t_{cp}$
9	Какой из критериев используется для оценки адекватности эмпирической математической модели	Стьюдента
		Кохрена
		Фишера
10	Определить рабочий объем аппарата идеального смешения с проскоком, если: производительность $G = 200$ л/мин; время пребывания $\tau = 30$ мин; доля проскока $m = 0,3$ .	6000 л
		1800 л
		7800 л
11	Кривой разгона (F-кривой) называется реакция объекта на:	импульсное возмущение
		периодическое возмущение
		ступенчатое возмущение
12	В уравнениях, описывающих однопараметрическую диффузионную модель, используется:	критерий Архимеда
		критерий Нуссельта
		критерий Пекле
13	Вычислить значение константы скорости при следующих	$\approx 0,097$
		$\approx 0,017$

№	Задание	Варианты ответа
	исходных данных: предэкспоненциальный множитель $k_0 = 2 \cdot 10^{14} \text{ мин}^{-1}$ ; энергия активации $E_a = 74000 \text{ Дж/моль}$ ; температура $T = -3^\circ\text{C}$ ; универсальная газовая постоянная $R = 8,31 \text{ Дж/(моль}\cdot\text{K)}$	$\approx 0,055$
14	Среди типовых гидродинамических моделей нет модели:	идеального вытеснения идеального поглощения идеального смешения
15	Размерность константы скорости второго порядка:	$\text{м}^3/\text{моль}$ $(\text{моль}\cdot\text{с})/\text{м}^3$ $\text{м}^3/(\text{моль}\cdot\text{с})$
16	Ячеечная модель описывается системой:	обыкновенных дифференциальных уравнений алгебраических уравнений интегральных уравнений
17	К числу комбинированных гидродинамических моделей относится реактор идеального смешения с:	орошением застойной зоной возвратным потоком

### 5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.

Методические указания для обучающихся по организации самостоятельной работы по дисциплине, включая перечень тем самостоятельной работы, формы текущего контроля по дисциплине и требования к их выполнению размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ(ТУ) на сайте: <http://media.technolog.edu.ru>.

### 6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.

Своевременное выполнение обучающимся мероприятий текущего контроля позволяет превысить (достигнуть) пороговый уровень («удовлетворительно») освоения предусмотренных элементов компетенций.

Результаты дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций превышен (достигнут) пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачета и защиты курсовой работы.

К сдаче зачета допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля.

Зачет предусматривают выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и комплектуются вопросами (заданиями). При сдаче зачета студент получает два вопроса из перечня вопросов, время подготовки студента к устному ответу - до 30 мин.

Пример варианта вопросов на зачет:

Вариант № 1

1. Химико-технологический процесс как объект математического моделирования.
2. Уравнение материального баланса математической модели аппарата идеального смешения.

**7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.**

**а) Основная литература:**

- 1 Гартман, Т.Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов / Т.Н. Гартман, Д.В. Клушин. – М. : Академкнига, 2006. – 416с.
- 2 Советов, Б. Я. Моделирование систем / Б. Я. Советов, С.А. Яковлев. – М.: Высш. шк., 2007. –343 с.
- 3 Чистякова, Т. Б. Применение универсальных моделирующих программ для синтеза и анализа технологических процессов: учеб.пособие /Т.Б. Чистякова, Л.В. Гольцева, А.В. Козлов. – СПб. :СПбГТИ(ТУ), 2011. – 66 с.
- 4 Дозорцев В.М. Компьютерные тренажеры для обучения операторов технологических процессов / В.М. Дозорцев, – М.: СИНТЕГ, 2009. – 372 с.

**б) Дополнительная литература:**

- 1 Гольцева, Л.В. Моделирование химико-технологических объектов в среде MATLAB 6.5 :учеб.пособие / Л.В. Гольцева, Г.В. Кузнецова, А.С. Пушкин.– СПб. : СПбГТИ(ТУ), 2005. – 59 с.
- 2 Поршневу, С. В. MATLAB 7. Основы работы и программирования / С.В. Поршневу.– БИНОМ / Лаборатория знаний, 2006.-319с.

**в) Вспомогательная литература:**

- 1 Семенов, М.Г. Введение в математическое моделирование / М.Г. Семенов. – М.: СОЛОН-Р, 2002. – 112 с.
- 2 Веселова, И.Ю. Моделирование: Вычислительный практикум/ И.Ю. Веселова, Ю.Б. Сениченков.– Изд-во СПбГТУ, 1999.- 108с.
- 3 Бусленко, Н.П. Моделирование сложных систем.Н.П. Бусленко–М.: Наука, 1978.–384с.
- 4 Бенькович, Е.С. Практическое моделирование динамических систем / Е.С. Бенькович, Ю.Б. Колесов, Ю.Б. Сениченков.–СПб.:БХВ-Петербург, 2002.-464с.
- 5 Самарский, А.А. Математическое моделирование. Идеи. Методы. Примеры / А.А. Самарский, А.П. Михайлов. – 2-е изд., испр. – М.: Наука, 2002. – 320 с.
- 6 Кафаров, В.В. Математическое моделирование основных процессов химических производств / В.В. Кафаров, М.Б. Глебов. – М.: Высш. шк., 1991. – 400 с.
- 7 Кафаров, В.В. Оптимизация теплообменных процессов и систем./В.В.Кафаров, В.П.Мешалкин, В.В.Гурьева– М.: Энергоатомиздат, 1988.- 192с.
- 8 Зарубин, В.С. Математическое моделирование в технике / В.С. Зарубин. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2001. – 496 с.
- 9 Прусаков, Г. М. Математические модели и методы в расчетах на ЭВМ / Г.М. Прусаков. – М.: Наука, Физматлит, 1993. – 144 с.
- 10 Говорухин, В. Компьютер в математическом исследовании / В. Говорухин, Б. Цибулин. – СПб.: Питер, 2001. – 619 с.

11 Кафаров, В.В. Математическое моделирование основных процессов химических производств./В.В.Кафаров, М.Б. Глебов. –Учебн. пособие для вузов. - М.: Высш. школа, 1991. - 400 с

12 Вычислительная математика в химии и химической технологии/ С.В. Брановицкая, Р.Б. Медведев, Ю.Я. Фиалков.- К.:Вицашк. Головное изд-во,1986.-216с

13 Ахназарова, С.Л., Методы оптимизации эксперимента в химической технологии: Учеб.пособие для хим.-технол. спец. Вузов.-2-е изд., перераб. и доп.- / С.Л.Ахназарова, В.В. КафаровМ.:Высш.шк.,1985.-327с

## **8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.**

учебный план, РПД и учебно-методические материалы:  
<http://media.technolog.edu.ru>

веб-страница журнала «Информационные технологии» <http://www.novtex.ru/IT>  
сайты информационных технологий: <http://inftech.webservis.ru>, <http://citforum.ru>  
информационно-аналитический портал «Научная электронная библиотека»

<http://elibrary.ru>

международные мультидисциплинарные аналитические реферативные базы данных научных публикаций <http://webofknowledge.com>, <http://scopus.com>

электронно-библиотечные системы:

«Электронный читальный зал – БиблиоТех» <https://technolog.bibliotech.ru/>;

«Лань» <https://e.lanbook.com/books/>.

## **9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.**

Все виды занятий по дисциплине «Компьютерное моделирование в химии и химической технологии» проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

СТО СПбГТИ 020-2011. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лабораторные занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 040-02. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования.

СТО СПбГТИ 018-2014. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Семинары и практические занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 044-2012. Виды учебных занятий. Курсовой проект. Курсовая работа. Общие требования.

СТП СПбГТИ 048-2009. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению.

Планирование времени, необходимого на изучение данной дисциплины, лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала.

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является:

плановость в организации учебной работы;

серьезное отношение к изучению материала;

постоянный самоконтроль.

На занятия студент должен приходиться, имея багаж знаний и вопросов по уже изученному материалу.

## **10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.**

### **10.1. Информационные технологии.**

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование информационных технологий:

- чтение лекций с использованием слайд-презентаций;
- взаимодействие с обучающимися посредством электронной почты.

## 10.2. Программное обеспечение.

В учебном процессе используется лицензионное системное и прикладное программное обеспечение, приведенное в таблице 1.

Таблица 1 – Лицензионное программное обеспечение

Наименование программного продукта	Лицензия
Microsoft Windows 7, 8.1	Лицензия по договору с СПбГТИ(ТУ) DreamSpark
Microsoft Visual Studio 2008, 2010, 2012	
Microsoft Visual C++ 2008	
Microsoft Microsoft .Net Framework 4.0, 4.5	
Microsoft Access 2007, 2013	
Microsoft Visio 2010	
LibreOffice, Apache OpenOffice.org	Бесплатная лицензия
Пакет символьной математики Mathcad 14.	Лицензия по договору с СПбГТИ(ТУ)
Программная среда MVStadium.	Бессрочная академическая лицензия

Кроме лицензионного программного обеспечения сторонних производителей при проведении учебных занятий широко используются проблемно-ориентированные программные комплексы для решения задач в области информатики и вычислительной техники, разработанные на кафедре САПРиУ СПбГТИ(ТУ) (таблица 2).

Таблица 2 – Используемые в учебном процессе проблемно-ориентированные программные комплексы, разработанные на кафедре САПРиУ СПбГТИ(ТУ)

Наименование программного комплекса	Номер и дата выдачи свидетельства об официальной/государственной регистрации программы для ЭВМ
Программный комплекс для изучения и исследования трубчатых реакторов	2006610987 от 16.03.06
Программный комплекс для обучения персонала процесса эмульсионной полимеризации	2003611871 от 12.08.03
Программный комплекс «Структурно-параметрический синтез математических моделей гидродинамики»	2003610156 от 14.01.03
Система анализа и синтеза математических моделей кинетики химических реакций	2001610773 от 21.06.01

## 10.3. Информационные справочные системы.

Международные мультидисциплинарные аналитические реферативные базы данных научных публикаций WebofScience (режим доступа: <http://apps.webofknowledge.com>, свободный с любого зарегистрированного компьютера института), Scopus (режим доступа: <http://www.scopus.com>, свободный с любого

зарегистрированного компьютера института);

справочно-поисковая система «КонсультантПлюс: Высшая школа» (режим доступа: <http://www.consultant.ru/hs>, свободный с любого зарегистрированного компьютера института).

### **11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.**

Для проведения занятий по дисциплине на кафедре систем автоматизированного проектирования и управления СПбГТИ(ТУ) имеется необходимая материально-техническая база, соответствующая действующим санитарным и противопожарным правилам и нормам:

Наименование компьютерного класса кафедры	Оборудование
Класс интегрированных систем проектирования и управления химико-технологическими процессами	30 посадочных мест. Учебная мебель, пластиковая доска. Персональные компьютеры (15 шт.): двухядерный процессор Intel Core 2 Duo (2,33 ГГц); ОЗУ 4096 Мб; НЖМД 250 Гб; CD/DVD привод, DVD-RW; видеокарта NVIDIA GeForce 8500 GT; звуковая и сетевая карты, встроенные в материнскую плату. Персональные компьютеры объединены в корпоративную вычислительную сеть кафедры и имеют выход в сеть «Интернет».
Класс информационных и интеллектуальных систем	40 посадочных мест. Учебная мебель, пластиковая доска. Персональные компьютеры (20 шт.): четырехядерный процессор Intel Core i7-920 (2666 МГц), ОЗУ 6 Гб; НЖМД 250 Гб; CD/DVD привод, DVD-RW; видеокарта NVIDIA GeForce GT 220 (1024 Мб); звуковая и сетевая карты, встроенные в материнскую плату. Персональные компьютеры объединены в корпоративную вычислительную сеть кафедры и имеют выход в сеть «Интернет».
Лекционная аудитория	56 посадочных мест. Учебная мебель. Мультимедийный проектор NEC NP41. Ноутбук Asus a6j на базе процессора Intel Core Duo T2000. Мультимедийная интерактивная доска ScreenMedia.

Лицензионное системное и прикладное программное обеспечение, используемое в учебном процессе по дисциплине, перечислено в подразделе 10.2.

### **12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.**

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями учебный процесс осуществляется в соответствии с Положением об организации учебного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья СПбГТИ(ТУ), утвержденным ректором 28.08.2014г.



**Фонд оценочных средств  
для проведения промежуточной аттестации по  
дисциплине «Компьютерное моделирование в химии и химической технологии»**

**1. Перечень компетенций и этапов их формирования.**

Компетенции		
Индекс	Формулировка	Этап формирования
ОПК-2	способность осваивать методики использования программных средств для решения практических задач	промежуточный
ПК-2	способность разрабатывать компоненты аппаратно-программных комплексов и баз данных, используя современные инструментальные средства и технологии программирования	промежуточный
ПК-3	способность обосновывать принимаемые проектные решения, осуществлять постановку и выполнять эксперименты по проверке их корректности и эффективности	промежуточный

**2. Показатели и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования, шкала оценивания.**

Показатели оценки результатов освоения дисциплины	Планируемые результаты	Критерий оценивания	Компетенции
Освоение раздела № 1	Знает физико-химические закономерности технологических процессов и явлений (законы описания явлений гидродинамики, химических реакций, теплообмена, массообмена), может применять для анализа технологических процессов с целью выявления основных модулей ММ.	Правильные ответы на вопросы №1-5 к зачету	ОПК-2
Освоение раздела №2	Знает основные виды математических моделей (ММ) ХТП, этапы разработки ММ; модульный подход синтеза ММ; Умеет разрабатывать алгоритмы решения прикладных задач;	Правильные ответы на вопросы №6-15, 42 к зачету	ПК-2, ПК-3
Освоение раздела № 3	Знает понятие о механизме реакций, о прямой и обратной задачах кинетики; структурно-параметрический синтез ММ кинетики. Описание	Правильные ответы на вопросы №16-25 к зачету	ПК-2, ПК-3

Показатели оценки результатов освоения дисциплины	Планируемые результаты	Критерий оценивания	Компетенции
	стехиометрии, кинетики, порядка и молекулярности реакций, зависимости от температуры и влияния катализатора. Умеет синтезировать ММ кинетики для реакторов непрерывного и периодического действия в режимах статики и динамики.		
Освоение раздела №4	Знает тепловые режимы реакторов и методику построения математических моделей реакторов различного типа. Может оценить тепловую устойчивость реакторов. Умеет разрабатывать алгоритмы и программы для расчета температуры различных видов теплообменных аппаратов в режимах статики и динамики.	Правильные ответы на вопросы №26-36 к зачету	ПК-2, ПК-3
Освоение раздела № 5	Знает виды гетерогенных систем и их классификация, механизмы переноса. Умеет синтезировать ММ типовых гетерогенных систем (сушка, фильтрование, отстаивание, абсорбция).	Правильные ответы на вопросы № 37, 38 к зачету	ПК-2, ПК-3
Освоение раздела № 6	Знает роль эмпирических моделей в составе ММ сложных химико-технологических процессов. Способы получения регрессионных моделей для описания свойств веществ, кинетических и теплофизических констант. Критерии оценки регрессионных моделей	Правильные ответы на вопросы №2,39 - 41 к зачету	ОПК-2 ПК-3
Освоение раздела №7	Знает основы использования универсальных моделирующих программ, место ММ в структуре комплексов. Способы задания исходных данных и отображения результатов моделирования. Анализ программных комплексов для изучения типовых процессов химической технологии.	Правильные ответы на вопросы № 21, 22 к зачету	ПК-2, ПК-3

Шкала оценивания соответствует СТО СПбГТИ(ТУ):  
промежуточная аттестация проводится в форме защиты курсовой работы, результат оценивания – «удовлетворительно», «хорошо», «отлично» и в форме зачета, результат оценивания – «зачтено», «не зачтено».

### **3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации.**

#### **а) Вопросы для оценки сформированности элементов компетенции ОПК-2:**

1. Химико-технологический процесс как объект математического моделирования.
2. Классификация математических моделей в ХТП.
3. Требования к математическим моделям: адекватность, точность, универсальность, экономичность.
4. Основные этапы разработки математических моделей.
5. Общие принципы построения математических моделей.

#### **б) Вопросы для оценки сформированности элементов компетенции ПК-2 и ПК-3:**

6. Структурные и функциональные модели в химико-технологических процессах
7. Гидродинамические модели структуры потоков в аппарате.
8. Кривые разгона и импульсные характеристики при исследовании гидродинамики потоков.
9. Уравнение материального баланса математической модели аппарата идеального смешения.
10. Уравнение материального баланса математической модели аппарата идеального вытеснения
11. Ячеечная модель описания структуры потоков в аппарате.
12. Комбинированные модели описания структуры потоков в аппарате.
13. Связь типовых математических моделей (идеального смешения идеального вытеснения, ячейной модели) с типовыми динамическими звеньями.
14. Математические модели с распределенными и с сосредоточенными параметрами.
15. Математические модели - статические и динамические.
16. Разработать блок-схему алгоритма решения аналитической ММ идеального смешения.
17. Разработать блок-схему алгоритма решения аналитической ячейной модели.
18. Характеристика методов решения ММ с сосредоточенными параметрами.
19. Блок-схема алгоритма решения диф. уравнений методом Эйлера.
20. Блок-схема алгоритма решения диф. уравнений методом Рунге – Кутты.
21. Методика решения математических моделей, описываемых системами алгебраических уравнений в среде MathCad.
22. Методика решения математических моделей, описываемых системами дифференциальных уравнений в среде MathCad.
23. Критерии оценки ММ – универсальность, точность, адекватность, экономичность.
24. Методы оценки эмпирических моделей.
26. Системный подход к формированию ММ ХТП. Математическое описание химических реакций. Прямая задачи кинетики.
32. Перенос тепла в реакторах с распределенными параметрами.
33. Перенос тепла в реакторах с сосредоточенными параметрами.
34. Уравнение материального баланса реактора идеального вытеснения; в реакторе происходит экзотермическая реакция  $A \longrightarrow B$  с константой скорости  $K$ .

35. Движущая сила массообменных процессов.

36. Использование эмпирических моделей различных этапах проектирования: для описания свойств веществ, кинетических и теплофизических констант и т.д.

37. Методы оценки эмпирических моделей.

38. Инструментальные среды для получения эмпирических моделей.

К зачету допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля. При сдаче зачета студент получает два вопроса из перечня, приведенного выше.

Время подготовки студента к устному ответу на вопросы - до 30 мин.

### **Темы и содержание курсовой работы**

**Целью курсовой работы** является закрепление практических умений, полученных студентами на лабораторных и практических занятиях и в результате самостоятельной работы по созданию математических моделей различных химико-технологических процессов, разработка алгоритмов решения задачи и создание программного продукта на языках высокого уровня.

**Обобщенная тематика курсовой работы** – «Разработка и анализ математической модели различных химико-технологических процессов».

Исходными данными для курсового проекта являются: индивидуальное задание на разработку конкретного приложения и методические указания к курсовой работе.

#### **Содержание курсовой работы:**

- 1 Аналитический обзор, включающий анализ литературных источников по технологии проведения заданного технологического процесса; анализ входных и выходных параметров; анализ аппаратного оформления процесса; анализ физико-химических законов, лежащих в основе проведения процесса; обзор имеющихся математических моделей.
- 2 Постановка цели и задач для создания программного продукта.
- 3 Основная часть работы включает: анализ процесса как объекта моделирования с указанием всех видов переменных, диапазонов их изменения; разработку эргономичного интерфейса пользователя; математическое описание процесса, обоснование выбора метода решения и разработку алгоритмического и программного обеспечения;
- 4 Выводы об универсальности, точности, адекватности и экономичности модели.
- 5 Тестирование разработанного программного продукта. Результаты численного эксперимента и их объяснение.
- 6 Оформление документации (пояснительной записки) к курсовой работе.

### **Примерные темы курсовой работы**

Моделирование процесса однократного испарения углеводородов
Моделирование процесса адсорбции в насадочном абсорбере
Моделирование процесса нитрования хлорбензола
Математическое моделирование процесса гравитационного осаждения
Моделирование кожухотрубчатого теплообменника в режиме прямотока и противотока
Моделирование процесса центрифугирования для центрифуги с ножевой выгрузкой осадка
Моделирование процесса сушки дисперсных материалов в сушильном электрошкафу
Моделирование политропического реактора идеального смешения
Моделирование процесса фильтрования на ленточном вакуум – фильтре.

Моделирование процесса измельчения в щековой дробилке.
Моделирование политропического реактора идеального смешения
Моделирование процесса горения топлива в топке (на примере мазута и сланца)
Математическое моделирование змеевикового теплообменника
Расчет статических характеристик модели реактора идеального смешения
Разработка программного обеспечения для моделирования процесса осаждения в центрифуге
Моделирование процесса измельчения в конусной дробилке
Математическое моделирование пластинчатого теплообменника
Моделирование процесса растворения газов в жидкости
Моделирование процесса фильтрования в барабанном фильтре

**4.Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.**

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СПбТИ:

СТО СПбТИ(ТУ) 016-2015. КС УКДВ. Порядок проведения зачетов и экзаменов.