

МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
**«Тверской государственный технический университет»**  
(ТвГТУ)

УТВЕРЖДАЮ  
Проректор  
по учебной работе

\_\_\_\_\_ Э.Ю. Майкова  
« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА**

дисциплины обязательной части Блока 1 «Дисциплины (модули)»

**«Численные методы в химии»**

Направление подготовки бакалавров 04.03.01 Химия

Направленность (профиль) – Медицинская и фармацевтическая химия

Тип задач профессиональной деятельности – научно-исследовательский

Форма обучения – очная

Химико-технологический факультет

Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации»

Тверь 20\_\_

Рабочая программа дисциплины соответствует ОХОП подготовки бакалавров в части требований к результатам обучения по дисциплине и учебному плану.

Разработчик программы:  
профессор кафедры БХС

В.П. Молчанов

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры БХС  
« \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 20 \_\_ г., протокол № \_\_\_\_.

Заведующий кафедрой

М.Г. Сульман

Согласовано:  
Начальник учебно-методического  
отдела УМУ

Д.А.Барчуков

Начальник отдела  
комплектования  
зональной научной библиотеки

О.Ф. Жмыхова

## 1. Цель и задачи дисциплины

**Целью** изучения дисциплины «Численные методы в химии» является изучение основ и методов математического моделирования химических и физико-химических процессов, оптимизации химико-технологических процессов.

**Задачами дисциплины** являются:

- формирование знаний об основных подходах к исследованию физико-химических процессов математическими методами; об основах алгоритмизации и программирования; методах оптимизации химико-технологических процессов;
- формирование способности применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования; Применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных;
- формирование навыков владения современными пакетами программ для математического моделирования; методами планирования экспериментов.

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к обязательной части Блока 1 ОП ВО. Для изучения курса требуются знания, полученные студентами при изучении дисциплин: «Неорганическая химия», «Математика», «Информатика».

Приобретенные знания в рамках данной дисциплины необходимы в дальнейшем при изучении следующих дисциплин: «Физические методы исследования», «Синтез препаратов и компьютерные методы их анализа», «Компьютерное моделирование лекарственных препаратов». Приобретенные знания в рамках данной дисциплины необходимы в дальнейшем при подготовке выпускной квалификационной работы.

## 3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

### 3.1 Планируемые результаты обучения по дисциплине

**Компетенция, закрепленная за дисциплиной в ОХОП:**

**ОПК-3.** Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники.

**Индикаторы компетенций, закреплённых за дисциплиной в ОХОП:**

**ИОПК-3.1.** *Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности.*

**Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций**

**Знать:**

31.1. Основные подходы к исследованию физико-химических процессов математическими методами с применением теоретических, эмпирических и полуэмпирических моделей, построенных с использованием средств вычислительной техники.

**Уметь:**

У1.1. Применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования.

**ИОПК-3.2.** *Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности.*

**Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций**

**Знать:**

32.1. Современные информационные технологии и программные средства, предназначенные для решения различных классов задач химической направленности.

**Уметь:**

У2.1. Выбирать современные информационные технологии и программные средства для решения различных классов задач химической направленности.

**Компетенция, закрепленная за дисциплиной в ОХОП:**

**ОПК-5.** Способен использовать существующие программные продукты и информационные базы данных для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности.

**Индикаторы компетенций, закреплённых за дисциплиной в ОХОП:**

**ИОПК-5.1.** *Использует современные IT-технологии при сборе, анализе, обработке и представлении информации химического профиля.*

**Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций**

**Знать:**

33.1. Современные пакеты программ для математического моделирования, а также для сбора, анализа, обработки и представления информации химического профиля.

**Уметь:**

У3.1. Применять современные программные средства и технологии для автоматизации решения прикладных задач химической направленности.

**ИОПК-5.2.** *Соблюдает нормы информационной безопасности в профессиональной деятельности.*

**Показатели оценивания индикаторов достижения компетенций**

**Знать:**

34.1. Методы обеспечения информационной безопасности, типовые программно-аппаратные средства и системы защиты информации от несанкционированного доступа в компьютерную среду.

**Уметь:**

У4.1. Выявлять угрозы информационной безопасности, проводить организационно-технические мероприятия по защите информации и использовать средства защиты информационных ресурсов.

**3.2. Технологии, обеспечивающие формирование компетенций**

Проведение лекционных занятий, лабораторных занятий; самостоятельная работа под руководством преподавателя.

#### 4. Трудоемкость дисциплины и виды учебной работы

Таблица 1. Распределение трудоемкости дисциплины по видам учебной работы

Вид учебной работы	Зачетные единицы	Академические часы
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b>	3	108
<b>Аудиторные занятия (всего)</b>		60
В том числе:		
Лекции		30
Практические занятия (ПЗ)		не предусмотрены
Лабораторные работы (ЛР)		30
<b>Самостоятельная работа обучающихся (всего)</b>		12+36(экз)
В том числе:		
Курсовая работа		не предусмотрена
Курсовой проект		не предусмотрен
Расчетно-графические работы		4
Другие виды самостоятельной работы: - подготовка к лабораторным работам		4
Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация (зачет)		не предусмотрен
Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация (экзамен)		4+36(экз)
<b>Практическая подготовка при реализации дисциплины (всего)</b>		0

#### 5. Структура и содержание дисциплины

##### 5.1. Структура дисциплины

Таблица 2. Модули дисциплины, трудоемкость в часах и виды учебной работы

№	Наименование модуля	Труд-ть часы	Лекции	Практич. занятия	Лаб. практикум	Сам. работа
1	Введение. Цель и задачи курса	13	4	-	4	1+4(экз.)
2	Основы алгоритмизации и программирования	14	4	-	4	2+4(экз.)
3	Основы математического моделирования и численных методов	15	4	-	4	1+6(экз.)
4	Моделирование основных химических процессов	18	6	-	4	2+6(экз.)
5	Методы решения прямой и обратной задач химической кинетики	17	4	-	5	2+6(экз.)
6	Методы оптимизации химико-технологических объектов	14	4	-	4	2+4(экз.)
7	Численные методы решения основных задач математического моделирования химических процессов с применением	17	4	-	5	2+6(экз.)

программных оболочек MS Excel, MathCAD, MATLAB					
<b>Всего на дисциплину</b>	<b>108</b>	<b>30</b>	<b>-</b>	<b>30</b>	<b>12+36(экс)</b>

## 5.2. Содержание дисциплины

### **МОДУЛЬ 1 «ВВЕДЕНИЕ. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ КУРСА»**

Понятие численного метода и его взаимосвязь с программированием. Краткая история развития численных методов и языков программирования. Роль численных методов в химии и химической технологии. Особенности применения математических методов и моделей в теории и практике. Практическое значение и эффективность использования ЭВМ при решении прикладных тематических задач. Основные задачи химии, для решения которых требуется применение численных методов и программирования.

### **МОДУЛЬ 2 «ОСНОВЫ АЛГОРИТМИЗАЦИИ И ПРОГРАММИРОВАНИЯ»**

Особенности выполнения вычислений на ЭВМ. Диапазон и точность представления чисел. Машинный нуль. Ошибки округления. Абсолютная и относительная погрешность результатов основных математических операций.

Алгоритмы и блок-схемы алгоритмов. Основные свойства и формы представления алгоритмов. Устойчивость вычислительных алгоритмов.

Структура программы: раздел описания и раздел операторов. Логические выражения. Типы величин. Константы и переменные. Массивы переменных. Стандартные математические функции. Программная реализация алгоритмов.

### **МОДУЛЬ 3 «ОСНОВЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ»**

Интерполяция и аппроксимация функциональных зависимостей. Способы сглаживания экспериментальных данных. Основные алгоритмы численного интегрирования. Численное дифференцирование, его связь с интерполяцией и аппроксимацией функций. Поиск минимума и максимума функции одной переменной. Поиск минимума и максимума функции многих переменных. Методы решения систем линейных уравнений. Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений и систем уравнений.

Основы математического моделирования. Понятие модели. Классификация математических моделей. Виды моделирования. Основные этапы математического моделирования. Создание математической модели. Реализация математической модели. Тестирование и отладка математической модели. Погрешности математического моделирования. Неустраняемая погрешность (погрешность модели) и устранимая погрешность (погрешность численного метода и погрешность вычислительная).

#### **МОДУЛЬ 4 «МОДЕЛИРОВАНИЕ ОСНОВНЫХ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ»**

Математическое моделирование теплообменных процессов. Математическое моделирование кинетики химических реакций. Математическое моделирование массообменных процессов. Математическое моделирование процессов переноса субстанции в пористых средах. Математическое моделирование химических реакторов.

#### **МОДУЛЬ 5 «МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ПРЯМОЙ И ОБРАТНОЙ ЗАДАЧ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ»**

Разностные методы решения прямой кинетической задачи. Методы локальной линеаризации. Постановка обратной кинетической задачи. Построение функционалов и методы их минимизации при решении обратной кинетической задачи. Анализ чувствительности применительно к уравнениям химической кинетики.

#### **МОДУЛЬ 6 «МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ»**

Постановка задачи и понятие оптимизационной модели. Структура оптимизационной модели (целевая функция, система ограничений, условия неотрицательности переменных). Линейные статистические модели и линейное программирование. Формулировка задач и их графическое решение. Алгебраический метод решения оптимизационных задач и симплекс-метод. Базисное решение. Условие оптимизации. Прикладные программы для решения задач методами линейного программирования.

Необходимые и достаточные условия существования экстремума. Классические методы оптимизации. Метод Гаусса-Зейделя. Симплексный метод. Градиентные методы оптимизации. Метод неопределенных множителей Лагранжа.

#### **МОДУЛЬ 7 «ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ОСНОВНЫХ ЗАДАЧ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ С ПРИМЕНЕНИЕМ ПРОГРАММНЫХ ОБОЛОЧЕК MS EXCEL, MATHCAD, MATLAB»**

Основные приемы работы с программой Microsoft Excel. Рабочие книги и рабочие листы. Типы данных в MS Excel. Использование формул для выполнения вычислений. Порядок выполнения арифметических операций, использование встроенных функций. Абсолютные и относительные ссылки на ячейки. Диапазоны ячеек, массивы, выполнение матричных операций. Расширение функциональности таблиц MS Excel. Программирование пользовательских функций на языке MS Visual Basic for applications.

Средства программирования в системе MathCAD. Интерполяция и аппроксимация функциональных зависимостей. Программная реализация численного интегрирования и дифференцирования в системе MathCAD. Поиск минимума и максимума функции одной переменной. Программная реализация поиска минимума и максимума функции одной и нескольких переменных в

системе MathCAD. Методы решения систем линейных уравнений. Метод Гаусса, матричные соотношения и операции, используемые в методе Гаусса. Программная реализация метода Гаусса в системе MathCAD. Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений и систем уравнений. Программная реализация численного решения обыкновенных дифференциальных уравнений и систем уравнений в системе MathCAD.

Основные приемы работы с программой MATLAB. Решение линейных уравнений с использованием системы MATLAB. Решение систем линейных уравнений с использованием системы MATLAB. Решение дифференциальных уравнений с использованием системы MATLAB.

### 5.3. Лабораторные работы

Таблица 3. Лабораторные работы и их трудоемкость

Порядковый номер модуля. Цели лабораторных работ	Наименование лабораторных работ	Трудоемкость в часах
<b>Модуль 1</b> <b>Цель:</b> Знакомство с основными правилами поведения в компьютерном классе.	Техника безопасности	4
<b>Модуль 2</b> <b>Цель:</b> формирование представлений об основах алгоритмизации и программирования.	Алгоритмы и блок-схемы алгоритмов. Основные свойства и формы представления алгоритмов. Программная реализация алгоритмов.	4
<b>Модуль 3</b> <b>Цель:</b> формирование представлений о математических моделях. Ознакомление с численными методами решения задач.	Принципы математического моделирования процессов химической технологии.	4
<b>Модуль 4</b> <b>Цель:</b> формирование представлений о принципах построения моделей основных химико-технологических процессов.	Примеры моделирования химико-технологических процессов.	4
<b>Модуль 5</b> <b>Цель:</b> формирование представлений о методах решения кинетических задач	Примеры решения кинетических задач.	5
<b>Модуль 6</b> <b>Цель:</b> формирование представлений о принципах оптимизации химико-технологических процессов	Методы оптимизации.	4
<b>Модуль 7</b> <b>Цель:</b> формирование навыков использования программных средств для решения основных	Реализация численных методов решения основных задач химической технологии в программной среде MS Excel Реализация численных методов решения	5

задач химической технологии.	основных задач химической технологии в программной среде MATLAB Реализация численных методов решения основных задач химической технологии в программной среде MathCAD	
------------------------------	--	--

#### **5.4. Практические занятия**

Учебным планом практические занятия не предусмотрены.

### **6. Самостоятельная работа обучающихся и текущий контроль успеваемости**

#### **6.1. Цели самостоятельной работы**

Основными целями самостоятельной работы бакалавров является формирование способностей к самостоятельному познанию и обучению, поиску литературы, обобщению, оформлению и представлению полученных результатов, их критическому анализу, поиску новых, рациональных и неординарных решений, аргументированному отстаиванию своих предложений, умений подготовки выступлений и ведения дискуссий.

#### **6.2. Организация и содержание самостоятельной работы**

Самостоятельная работа заключается в изучении отдельных тем курса по заданию преподавателя по рекомендуемой им учебной литературе, в подготовке к лабораторным занятиям, к текущему контролю успеваемости; подготовке к экзамену.

После вводных лекций, в которых обозначается содержание дисциплины, ее проблематика и практическая значимость, студентам выдаются задания на лабораторные занятия. Студенты выполняют задания в часы СРС в течение семестра в соответствии с освоением учебных разделов. Защита выполненных заданий производится поэтапно в часы практических занятий. Оценивание осуществляется путем устного опроса проводится по содержанию и качеству выполненного задания.

### **7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины**

#### **7.1. Основная литература по дисциплине**

1. Алибеков, И.Ю. Численные методы : учеб. пособие для вузов : в составе учебно-методического комплекса / И.Ю. Алибеков. - М. : Московский гос. индустриальный ун-т, 2008. - 219 с. - (УМК-У). - Библиогр. : с. 219. - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-2760-1462-3 : 243 p. - (ID=76211-6)

2. Гумеров, А.М. Математическое моделирование химико-технологических процессов : учебное пособие для вузов по направлениям подготовки "Химическая технология" и "Энерго- и ресурсообеспечивающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии" / А.М. Гумеров. - 2-е изд. ; перераб. - Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2022. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 25.07.2022. - ISBN 978-5-8114-1533-5. - URL: <https://e.lanbook.com/book/211445> . - (ID=106016-0)

3. Фаддеев, М.А. Элементарная обработка результатов эксперимента : учебное пособие / М.А. Фаддеев; Фаддеев М.А. - Нижний Новгород : Нижний Новгород : ННГУ им. Н.И. Лобачевского, 2010. - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - URL: <https://e.lanbook.com/book/152927> - (ID=81446-0)

## 7.2. Дополнительная литература по дисциплине

1. Бахвалов, Н.С. Численные методы в задачах и упражнениях : в составе учебно-методического комплекса / Н.С. Бахвалов, А.В. Лапин, Е.В. Чижонков. - Москва : Высшая школа, 2000. - 190 с. - (Высшая математика) (УМК-У). - ISBN 5-06-003684-7 : 35 p. - (ID=6831-21)

2. Введение в математическое моделирование : учеб. пособие для вузов : в составе учебно-методического комплекса / В.Н. Ашихмин [и др.]; под ред. П.В. Трусова. - Москва : Интернет Инжиниринг, 2000. - 332 с. : ил. - (УМК-У). - Текст : непосредственный. - ISBN 5-89594-042-0 : 70 p. - (ID=6988-18)

3. Кафаров, В. В. Математическое моделирование основных процессов химических производств : учебное пособие для вузов / В. В. Кафаров, М. Б. Глебов. — 2-е изд., перераб. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2022. — 403 с. — (Высшее образование). — ISBN 978-5-534-07524-3. — Текст : электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. — URL: <https://urait.ru/bcode/493798> (дата обращения: 28.09.2022). - (ID=150445-0)

4. Киреев, В.И. Численные методы в примерах и задачах : учебное пособие для вузов по напр. "Прикладная математика" : в составе учебно-методического комплекса / В.И. Киреев, А.В. Пантелеев. - 4-е изд. ; испр. - Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2015. - 447 с. - (Учебники для вузов. Специальная литература) (УМК-У). - Текст : непосредственный. - ISBN 978-508114-1888-6 : 1800 p. 04 к. - (ID=112380-3)

5. Зализняк, В.Е. Численные методы. Основы научных вычислений : учебник и практикум для академического бакалавриата : ЭБС Юрайт : в составе учебно-методического комплекса / В.Е. Зализняк; Сибирский федер. ун-т (г. Красноярск). - 2-е изд. - Москва : Юрайт, 2022. - (УМК-У) (Бакалавр. Академический курс). - Текст : электронный. - ISBN 978-5-534-02714-3. - URL: <https://urait.ru/bcode/468584> . - (ID=113997-0)

6. Аверина, Т.А. Численные методы. Верификация алгоритмов решения систем со случайной структурой : учебное пособие для вузов / Т.А. Аверина. - Москва : Юрайт, 2022. - Образовательная платформа Юрайт. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 07.07.2022. - ISBN 978-5-534-07205-1. - URL: <https://urait.ru/bcode/494173> . - (ID=144968-0)

7. Аверина, Т.А. Численные методы. Алгоритмы моделирования систем со случайной структурой : учебное пособие для вузов / Т.А. Аверина. - Москва : Юрайт, 2022. - Образовательная платформа Юрайт. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 07.07.2022. - ISBN 978-5-534-07204-4. - URL: <https://urait.ru/bcode/494174> . - (ID=144967-0)

8. Пирумов, У.Г. Численные методы : учебник и практикум для вузов / У.Г. Пирумов, д.]. [и; под редакцией У.Г. Пирумова. - 5-е изд. ; доп. и перераб. - Москва : Юрайт, 2022. - (Высшее образование). - Образовательная платформа

Юрайт. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 23.09.2022. - ISBN 978-5-534-03141-6. - URL: <https://urait.ru/book/chislennye-metody-488879> . - (ID=150437-0)

9. Слабнов, В.Д. Численные методы : учебник для вузов / В.Д. Слабнов. - 2-е изд. ; стер. - Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2022. - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 07.07.2022. - ISBN 978-5-507-44169-3. - URL: <https://e.lanbook.com/book/215762> . - (ID=148006-0)

10. Зенков, А.В. Численные методы : учебное пособие для вузов / А.В. Зенков. - Москва : Юрайт, 2022. - (Высшее образование). - Образовательная платформа Юрайт. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 07.07.2022. - ISBN 978-5-534-10893-4. - URL: <https://urait.ru/bcode/491582> . - (ID=145451-0)

### **7.3. Методические материалы**

1. Балашов, А.Н. Решение прикладных задач аналитическими и численными методами : учеб. пособие / А.Н. Балашов, Л.М. Пиджакова, М.А. Шестакова; Тверской гос. техн. ун-т. - Тверь : ТвГТУ, 2016. - Сервер. - Текст : электронный. - ISBN 978-5-7995-0838-8 : 0-00. - URL: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/113200> . - (ID=113200-1)

2. Рыгалин, В.А. Численные методы : слайд-лекции для спец. ХИМ / В.А. Рыгалин; Тверской гос. техн. ун-т, Каф. ИПМ. - Тверь : ТвГТУ, 2008. - CD. - Текст : электронный. - 0-00. - (ID=72387-1)

### **7.4. Программное обеспечение по дисциплине**

Операционная система Microsoft Windows: лицензии № ICM-176609 и № ICM-176613 (Azure Dev Tools for Teaching).

Microsoft Office 2007 Russian Academic: OPEN No Level: лицензия № 41902814.

### **7.5. Специализированные базы данных, справочные системы, электронно-библиотечные системы, профессиональные порталы в Интернет**

ЭБС и лицензионные ресурсы ТвГТУ размещены:

1. Ресурсы: <https://lib.tstu.tver.ru/header/obr-res>
2. ЭК ТвГТУ: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/Web>
3. ЭБС "Лань": <https://e.lanbook.com/>
4. ЭБС "Университетская библиотека онлайн": <https://www.biblioclub.ru/>
5. ЭБС «IPRBooks»: <https://www.iprbookshop.ru/>
6. Электронная образовательная платформа "Юрайт" (ЭБС «Юрайт»): <https://urait.ru/>
7. Научная электронная библиотека eLIBRARY: <https://elibrary.ru/>
8. Информационная система "ТЕХНОРМАТИВ". Конфигурация "МАКСИМУМ": сетевая версия (годовое обновление): [нормативно-технические, нормативно-правовые и руководящие документы (ГОСТы, РД, СНИПы и др.). Диск 1, 2, 3,

4. - М.:Технорматив, 2014. - (Документация для профессионалов). - CD. - Текст: электронный. - 119600 р. – (105501-1)
9. База данных учебно-методических комплексов: <https://lib.tstu.tver.ru/header/umk.html>

УМК размещен: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/115616>

## **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины**

При изучении дисциплины «Численные методы в химии» используются современные средства обучения, возможна демонстрация лекционного материала с помощью проектора. Аудитория для проведения лекционных занятий, проведения защит и презентаций курсовых работ оснащена современной компьютерной и офисной техникой, необходимым программным обеспечением, электронными учебными пособиями и законодательно-правовой поисковой системой, имеющий выход в глобальную сеть.

Для проведения лабораторных работ имеются лаборатории с персональными компьютерами (наличие локальной вычислительной сети необязательно).

## **9. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации**

### **9.1. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме экзамена**

1. Экзаменационный билет соответствует форме, утвержденной Положением о рабочих программах дисциплин, соответствующих федеральным государственным образовательным стандартам высшего образования с учетом профессиональных стандартов. Типовой образец экзаменационного билета приведен в Приложении. Обучающемуся даётся право выбора заданий из числа, содержащихся в билете, принимая во внимание оценку, на которую он претендует.

Число экзаменационных билетов – 20. Число вопросов (заданий) в экзаменационном билете – 3 (1 вопрос для категории «знать» и 2 вопроса для категории «уметь»).

Продолжительность экзамена – 60 минут.

2. Шкала оценивания промежуточной аттестации в форме экзамена – «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

3. Критерии оценки за экзамен:

для категории «знать»:

выше базового – 2;

базовый – 1;

ниже базового – 0;

критерии оценки и ее значение для категории «уметь»:

отсутствие умения – 0 балл;

наличие умения – 2 балла.

«отлично» - при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» - при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» - при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» - при сумме баллов 0, 1 или 2.

4. Вид экзамена – письменный экзамен, включающий решение задач с использованием ЭВМ и справочного материала.

**5. База заданий, предъявляемая обучающимся на экзамене:**

1. Моделирование. Аспекты применения моделирования. Математическое моделирование.

2. Математическое моделирование в естествознании. Физические основы моделирования. Способы синтеза математических моделей. Проблема моделирования сложных объектов.

3. Идентификация технических объектов. Моделирование технологических процессов.

4. Блочный принцип построения математических моделей.

5. Математическое моделирование формальной кинетики химических процессов.

6. Анализ методов решения обратной задачи химической кинетики.

7. Понятие о квантово-химических методах расчета.

8. Аппарат идеального смешения. Математическое описание в установившемся и неустойчивом режиме.

9. Аппарат идеального вытеснения. Математическое описание и метод решения.

10. Выбор и реализация метода решения уравнений математического описания. Машинное решение уравнений. Особенности решения дифференциальных уравнений.

11. Регрессионный анализ. Уравнения регрессии.

12. Аппроксимация экспериментальных данных. Точность аппроксимации.

13. Особенности аппроксимации многочленами. Теорема Вейерштрасса.

14. Параметрическая идентификация. Метод наименьших квадратов.

15. Экспериментальный одно- и многофакторный отклик. Математическая формализация функции отклика. Построение уравнения регрессии двухфакторного отклика в виде параболоида.

16. Понятие о планировании экспериментов. Реализация стратегии планирования эксперимента. Особенности организации активного и пассивного эксперимента.

17. Автоматизация экспериментальных исследований. Классификация экспериментов в аспекте их автоматизации.

18. Критерии сложности экспериментальных исследований. Лабораторный эксперимент.

19. Сложный исследовательский эксперимент.

20. Исследование физических процессов: масштабное моделирование.

21. Исследование физических процессов: аналоговое моделирование.

22. Исследование физических процессов: полунатурное моделирование.

23. Исследование физических процессов: математическое моделирование.

24. Промышленный эксперимент.
25. Задачи автоматизации экспериментальных исследований. Типовая схема автоматизации.
26. Применение электронно-вычислительной техники для автоматизации исследований.
27. Цели автоматизации экспериментов. Программно-аппаратные комплексы автоматизации.
28. Эффективность автоматизированных систем в экспериментальных исследованиях.
29. Теоретические основы разработки экспериментальных методик. Содержание экспериментальных исследований.
30. Этапы экспериментальных исследований. Методы описания результатов эксперимента.
31. Отклонения от ожидаемого значения экспериментальных наблюдений. Методы уменьшения отклонений.
32. Практическая реализация процесса измерений. Типы измерений.
33. Использование численных методов на различных этапах создания новых химических производств. Система автоматизированного эксперимента.
34. Анализ микрокинетики. Получение и представление кинетических данных.
35. Интегральный метод анализа кинетических данных.
36. Дифференциальный метод анализа кинетических данных.
37. Изменение температуры и объема как факторы, влияющие на скорость химического процесса.
38. Определение лимитирующей стадии в гетерогенных системах. Влияние диффузионного сопротивления.
39. Гетерогенные каталитические реакции: особенности описания и анализ кинетических гипотез.
40. Типы лабораторных каталитических реакторов. Выбор лабораторного реактора.
41. Исследование макрокинетики. Последовательность анализа.
42. Выбор реактора для макрокинетических исследований. Циркуляционная схема организации процесса.
43. Расчет количества катализатора для адиабатического реактора. Оценка стоимости реакторной установки.
44. Управление реакторами воздействием по расходу и соотношению подачи реагентов.
45. Управление реакторами воздействием по расходу теплоносителя и его температуре.
46. Аппараты с промежуточным теплообменом.
47. Аппараты с внутренним теплообменом.
48. Сравнительная характеристика аппаратов с промежуточным и внутренним теплообменом. Аппараты с комбинированной схемой.
49. Типовые схемы теплосъема и анализ устойчивости реакторов.

50. Синтез системы автоматизированного проектирования. Структура системы и анализ ресурсов проектирования.

51. Математическое и информационное обеспечение системы автоматизированного проектирования.

52. Исследование механизмов химических реакций. Обоснование выбора стратегии.

53. Компьютерное планирование органического синтеза и моделирование механизмов химических реакций: сходства и различия стратегических подходов.

54. Особенности процедуры выдвижения гипотез о механизмах реакций. Типы применяемого программного обеспечения, их характеристика и сравнительный анализ.

55. Исследование механизмов реакций. Программы формально-логического направления.

56. Исследование механизмов реакций. Программы эмпирического направления.

57. Структура процесса принятия решений при определении механизма химической реакции. Выбор и использование компьютерных программ для конкретных объектов на разных этапах исследования.

58. Особенности исследования механизмов каталитических реакций. Автоматизация построения кинетических моделей.

59. Способы компьютерного кодирования химических структур.

60. Понятие об экспертных системах. Применение экспертных систем в химии.

Пользование различными техническими устройствами, кроме ЭВМ компьютерного класса и программным обеспечением, необходимым для решения поставленных задач, не допускается. При желании студента покинуть пределы аудитории во время экзамена экзаменационный билет после его возвращения заменяется.

Преподаватель имеет право после проверки письменных ответов на экзаменационные вопросы и решенных на компьютере задач задавать студенту в устной форме уточняющие вопросы в рамках содержания экзаменационного билета, выданного студенту.

Иные нормы, регламентирующие процедуру проведения экзамена, представлены в Положении о текущем контроле успеваемости и промежуточной аттестации студентов.

## **9.2. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме зачета**

Учебным планом зачет по дисциплине не предусмотрен.

## **9.3. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме курсового проекта или курсовой работы**

Учебным планом не предусмотрены.

#### **10. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины**

Студенты перед началом изучения дисциплины ознакомлены с системами кредитных единиц и балльно-рейтинговой оценки.

Студенты, изучающие дисциплину, обеспечиваются электронными изданиями или доступом к ним, учебно-методическим комплексом по дисциплине, включая методические указания к выполнению практических работ, всех видов самостоятельной работы.

В учебный процесс рекомендуется внедрение субъект-субъектной педагогической технологии, при которой в расписании каждого преподавателя определяется время консультаций студентов по закрепленному за ним модулю дисциплины.

#### **11. Внесение изменений и дополнений в рабочую программу дисциплины**

Содержание рабочих программ дисциплин ежегодно обновляется протоколами заседаний кафедры по утвержденной «Положением о структуре, содержании и оформлении рабочих программ дисциплин по образовательным программам, соответствующим ФГОС ВО с учетом профессиональных стандартов» форме.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Тверской государственный технический университет»

Направление подготовки бакалавров 04.03.01 Химия  
Профиль – Медицинская и фармацевтическая химия  
Кафедра Биотехнологии, химии и стандартизации  
Дисциплина «Численные методы в химии»  
Семестр 3

**ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 1**

1. Задание для проверки уровня «знать» – или 0, или 1, или 2 балла:  
Задачи автоматизации экспериментальных исследований. Типовая схема автоматизации.

2. Задание для проверки уровня «знать» – или 0, или 1, или 2 балла:  
Исследование механизмов химических реакций. Обоснование выбора стратегии.

3. Задание для проверки уровня «уметь» – или 0, или 1 балл:  
Построить интерполяционный многочлен Лагранжа первой степени и определить значение  $Y(X=7)$  для следующего набора исходных данных:

X	2	4	6	8	10	12	14	16	18
Y	1	3	6	8	11	13	16	18	21

4. Задание для проверки уровня «владеть» – или 0, или 2 балла:  
Опишите способы синтеза математических моделей. Проблема моделирования сложных объектов.

**Критерии итоговой оценки за экзамен:**

«отлично» – при сумме баллов 7 и отсутствии балла 0;  
«хорошо» – при сумме баллов от 5 до 6 и наличии не более 1 нулевого балла;  
«удовлетворительно» – при сумме баллов 4 и наличии не более 2 нулевых баллов;  
«неудовлетворительно» – при сумме баллов менее 4 или наличии более 2 нулевых баллов.

Составитель: д.т.н., профессор кафедры БХС

В.П. Молчанов

Заведующий кафедрой БХС, д.х.н., профессор

М.Г. Сульман