

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Сыров Игорь Анатольевич
Должность: Директор
Дата подписания: 21.08.2023 20:51:53
Уникальный программный ключ:
b683afe664d7e9f64175886cf9626a196149ad36

СТЕРЛИТАМАКСКИЙ ФИЛИАЛ
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО
УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«УФИМСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ»

Факультет
Кафедра

Естественнонаучный
Химии и химической технологии

Аннотация рабочей программы дисциплины (модуля)

дисциплина ***Б1.О.10 Математические методы в органической химии***

обязательная часть

Направление

04.04.01
код

Химия
наименование направления

Программа

Фундаментальная и прикладная химия

Форма обучения

Очная

Для поступивших на обучение в
2022 г.

Стерлитамак 2023

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций

Формируемая компетенция (с указанием кода)	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине (модулю)
ОПК-3. Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	ОПК-3.1. знает современные IT-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля.	Обучающийся должен знать основную современную аппаратуру, компьютерную технологию, основные приемы работы со специализированным программным обеспечением при решении задач профессиональной деятельности, проведении теоретических расчетов и обработке результатов экспериментов, хранении и представлении научной информации, при решении задач профессиональной деятельности.
	ОПК-3.2. использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности.	Обучающийся должен уметь подбирать основную аппаратуру для проведения научных исследований, обобщать и анализировать результаты эксперимента, формулировать выводы, получать новые прикладные и научные результаты, использует специализированное программное обеспечение при проведении научных исследований.
	ОПК-3.3. использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием.	Обучающийся должен владеть современными компьютерными технологиями, использует специализированное программное обеспечение при решении задач профессиональной сферы деятельности, при обработке результатов научных экспериментов сборе, хранении и передачи информации. Навыками работы на современной научной аппаратуре для реализации и исследования новых технологий.

2. Цели и место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Цели изучения дисциплины:

1. Формирование системы знаний, умений и навыков в области разработки и применения математических моделей химико-технологических процессов, производств и отдельных аппаратов.
2. Владение знаниями в области моделирования процессов и аппаратов химической технологии, составление и оптимизация математических моделей, использование современных математических программных пакетов в моделировании;
3. Формировании профессиональных навыков моделирования химико-технологических процессов, организации и проведения эксперимента, по анализу и обработке данных с использованием современных информационных технологий.

Дисциплина «Математические методы в органической химии» относится к обязательной части.

Дисциплина изучается на 1 курсе в 1 семестре

3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость (объем) дисциплины составляет 4 зач. ед., 144 акад. ч.

Объем дисциплины	Всего часов
	Очная форма обучения
Общая трудоемкость дисциплины	144
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	
лекций	10
практических (семинарских)	18
другие формы контактной работы (ФКР)	1,2
Учебных часов на контроль (включая часы подготовки):	34,8
экзамен	
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР)	80

Формы контроля	Семестры
экзамен	1

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины и трудоемкость по видам учебных занятий (в академических часах)

№ п/п	Наименование раздела / темы дисциплины	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)			СР
		Контактная работа с преподавателем			
		Лек	Пр/Сем	Лаб	

1	Безымянный	10	18	0	80
1.1	Тема 1. Применения ЭВМ в химической технологии.	2	3	0	16
1.2	Тема 2. Виды моделирования. Этапы составления математического описания химических процессов	2	3	0	16
1.3	Тема 3. Методы исследования структуры потоков	2	4	0	16
1.4	Тема 4. Составление математических моделей	2	4	0	16
1.5	Тема 5. Обработка результатов активных экспериментов и оптимальное планирование	2	4	0	16
	Итого	10	18	0	80

4.2. Содержание дисциплины, структурированное по разделам (темам)

Курс лекционных занятий

№	Наименование раздела / темы дисциплины	Содержание
1	Безымянный	
1.1	Тема 1. Применения ЭВМ в химической технологии.	Введение в дисциплину. Области применения ЭВМ в химической технологии. Переработка больших массивов информации. Обработка экспериментальных данных. Математическое моделирование. Оптимальное проектирование. Управление
1.2	Тема 2. Виды моделирования. Этапы составления математического описания химических процессов	Математическое моделирование химических процессов. Виды моделирования: физическое и математическое. Основные виды математических моделей: статистическая, динамическая и полная математическая модель. Выбор и построение модели процесса. Этапы составления математического описания. Состав математического описания. Моделирующий алгоритм. Установление адекватности математических моделей реальным объектам. Способы построения математических моделей. Математическое моделирование. Виды математических моделей: статистическая и динамическая. Выбор и построение модели с учетом закономерностей процесса. Составление моделирующего алгоритма для решения уравнений математического описания. Установление адекватности математических моделей реальным объектам. Способы построения математических моделей: аналитические, экспериментальные, экспериментально-аналитические
1.3	Тема 3. Методы исследования структуры потоков	Импульсный ступенчатый и гармоничный методы исследования структуры потоков. Сущность методов-измерение концентрации индикатора, который вводят на входе в аппарат ,на выходе потока как функцию времени: $C=f(t)$, Основные характеристики распределения элементов потока по времени пребывания в аппарате (моменты функции

		распределения.)
1.4	Тема 4. Составление математических моделей	Математические модели, составленные экспериментально-статическим методом. Параметрическая идентификация моделей методом наименьших квадратов. Регрессионный анализ: проверка воспроизводимости опытов; оценка значимости коэффициентов уравнения регрессии; проверка адекватности модели. Корреляционный анализ: коэффициент корреляции; частный коэффициент корреляции; множественный коэффициент корреляции. Определение параметров нелинейных регрессионных моделей
1.5	Тема 5. Обработка результатов активных экспериментов и оптимальное планирование	Обработка результатов активных экспериментов и оптимальное планирование экспериментов. Полный факторный эксперимент и обработка его результатов. Матрица полного факторного эксперимента и её свойства. Расчет коэффициентов уравнения регрессии. Дробный факторный эксперимент. Матрица дробного факторного эксперимента. Планирование со смешиванием. Определение совместных оценок коэффициентов регрессии. Разрешающая способность матрицы планирования. Расчет коэффициентов регрессии. Эксперименты на основе планов второго порядка. Ортогональное центральное композиционное планирование.

Курс практических/семинарских занятий

№	Наименование раздела / темы дисциплины	Содержание
1	Безымянный	
1.1	Тема 1. Применения ЭВМ в химической технологии.	Устный опрос. Знание современных IT-технологий при сборе, анализе и представлении информации химического профиля. Способность использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности. Описание устного опроса: В задачу устного опроса по математическим методам в органической химии входит проверка знаний основных законов и понятий, систематических знаний фактов и теорий, умение применять теории для объяснения фактов и использовать их для иллюстрации изученных теорий. Проверая знания, необходимо учитывать умение обучающихся излагать материал в системе, делать выводы, мыслить логически. Пример варианта вопросов для устного опроса: 1. Области применения ЭВМ в химической технологии; 2. Виды моделирования; 3. Выбор и построение модели процесса; 4. Этапы составления математического описания, моделирующий алгоритм; 5. Установление адекватности математических моделей

		<p>реальным объектам;</p> <p>6. Математическое описание структуры потоков в аппарате;</p> <p>7. Импульсный метод исследования структуры потоков;</p> <p>8. Метод ступенчатого возмущения;</p> <p>9. Типовые математические модели структуры потоков в аппаратах;</p> <p>10. Основные характеристики распределения элементов потока по времени пребывания в аппарате (моменты функции распределения.</p> <p>Описание методики оценивания устного опроса: Критерии оценки (в баллах) 5 баллов - ответ полный и правильный на основании изученных теорий;</p> <p>- материал изложен в определенной логической последовательности, литературным языком;</p> <p>- ответ самостоятельный.</p> <p>4 балла - ответ полный и правильный на основании изученных теорий;</p> <p>- материал изложен в определенной логической последовательности, при этом допущены две-три несущественные ошибки, исправленные по требованию учителя.</p> <p>3 балла - ответ полный, но при этом допущена существенная ошибка или ответ неполный, несвязный.</p> <p>2 балла - при ответе обнаружено непонимание учащимся основного содержания учебного материала или допущены существенные ошибки, которые учащийся не может исправить при наводящих вопросах учителя, отсутствие ответа.</p>
1.2	<p>Тема 2. Виды моделирования. Этапы составления математического описания химических процессов</p>	<p>Тест – система лаконично и точно сформулированных и стандартизированных заданий, на которые необходимо дать в течение ограниченного времени краткие и точные ответы, оцениваемые по системе баллов. Задания представлены тестами закрытого типа - тестами с выбором одного правильного ответа, или ответы с вариантами выбора, при выполнении которых испытуемому необходимо выбрать, как правило, один правильный ответ из приведенного списка возможных ответов.</p> <p>Пример варианта тестовых заданий: 1. Какому типу аппаратов соответствует процесс модели идеального вытеснения? Выберите один ответ: 1. Колонному 2) Баковому 3) Емкостному</p>

	<p>4) Трубчатому</p> <p>2. Структура какого порядка, предназначенного для происхождения коэффициентов квадратичной модели, имеет существенное значение для экспериментаторов? Выберите один ответ:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) Нулевого порядка 2) второго порядка 3) Первого порядка 4) Третьего порядка. <p>3. На сколько частей делится новый интервал L1 по правилу золотого сечения? Выберите один ответ:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) На три 2) На шесть 3) На два 4) На четыре. <p>4. Какой эксперимент проводится по заранее составленному плану, в соответствии с которым ставится задача не только определения оптимальных условий проведения эксперимента, но и оптимизации процесса? Выберите один ответ:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) Лабораторный 2) Полевой 3) Пассивный 4) Активный <p>Описание методики оценивания выполненных тестовых заданий: Критерии оценки (в баллах) За выполнение каждого тестового задания испытуемому выставляются баллы. Тип используемой шкалы оценивания - номинальная шкала, которая предполагает, что за правильный ответ к каждому заданию выставляется один балл, за не правильный — ноль. В соответствии с номинальной шкалой, оценивается всё задание в целом, а не какая-либо из его частей. Общая сумма баллов за все правильные ответы составляет наивысший балл, например 9 баллов. В спецификации указывается общий наивысший балл по тесту. Также устанавливается диапазон баллов, которые необходимо набрать для того, чтобы получить отличную, хорошую, удовлетворительную или неудовлетворительную оценки. В процентном соотношении оценки (по пятибалльной системе) рекомендуется выставлять в следующих диапазонах:</p> <ul style="list-style-type: none"> “2”- менее 50% “3”- 50%-65% “4”- 65%-85% “5”- 85%-100%
--	--

1.3	Тема 3. Методы исследования структуры потоков	<p>Контрольная работа : владеет современными компьютерными технологиями, использует специализированное программное обеспечение при решении задач профессиональной сферы деятельности. Каждому студенту предлагается индивидуальный вариант, который содержит 2 теоретических вопроса для подготовки к экзамену.</p> <p>Пример варианта контрольной работы:</p> <p>1. Расчет коэффициентов регрессии для полного факторного эксперимента (ПФЭ) методом наименьших квадратов</p> <p>2. Проверка гипотезы о значимости коэффициентов уравнения регрессии с помощью критерия Стьюдента</p> <p>Описание методики оценивания:</p> <p>Критерии оценки (в баллах)</p> <ul style="list-style-type: none"> - <u>5</u> баллов выставляется студенту, если он выполнил все 2 заданий верно; - <u>4</u> баллов выставляется студенту, если он выполнил все 2 заданий верно, но допустил 1-2 несущественных ошибки; - <u>3</u> балла выставляется студенту, если он выполнил все задания, но допустил 1 существенную ошибку и 1-2 несущественных ошибки; - <u>2</u> балла выставляется студенту, если он выполнил половину заданий или допустил 2-3 существенные ошибки.
1.4	Тема 4. Составление математических моделей	<p>Лабораторные работы. Каждому студенту предлагаются индивидуальные варианты лабораторно - практического задания, который выполняется в компьютерной лаборатории (аудитории)</p> <p>Структура практической работы по дисциплине "Математическое моделирование химических процессов" представлена ниже:</p> <p>Лабораторная работа № 4</p> <p>Многомерная оптимизация.</p> <p>Поиск экстремума методом Гаусса-Зейделя</p> <p>Цель работы.</p> <p>Освоение метода многомерной оптимизации Гаусса-Зейделя.</p> <p>Порядок выполнения работы</p> <p>1. Для выполнения лабораторной работы запустить файл LP5.EXE. В контуре «Исходные данные» напротив ячеек «Расход пропана, куб. м в час» и «Температура, град. Цельсий» вводятся соответствующие значения. При нажатии кнопки «Расчет выхода пропилена» производится вычисление выхода пропилена в зависимости от заданных условий.</p> <p>2. Получить от преподавателя начальные исходные данные (температуру, расход и шаг расчета для температуры и расхода). Ввести в ячейки исходных</p>

		<p>данных полученные значения.</p> <p>3. Согласно пунктам 1 и 2 алгоритма, указанного в п. 5.2, методом сканирования вычислить локальные значения максимума выхода пропилена.</p> <p>4. При завершении 1-го цикла расчета разделить заданные шаги для расчета температуры и расхода пополам и продолжить расчет по пунктам 1 и 2 указанного алгоритма (в случае, если при делении шага пополам и дальнейшем расчете максимум не определяется, следует еще раз разделить шаг на два).</p> <p>5. Дать геометрическую интерпретацию хода поиска экстремального значения Y.</p> <p>6. По полученным результатам сделать выводы.</p> <p>7. Составить отчет о проделанной работе</p>
1.5	<p>Тема 5. Обработка результатов активных экспериментов и оптимальное планирование</p>	<p>Экзаменационные билеты.</p> <p>Структура экзаменационного билета: Экзамен проводится в виде индивидуального опроса по билетам.</p> <p>Из подготовленного перечня вопросов к промежуточной аттестации сформировано 18 экзаменационных билетов. Экзаменационный билет содержит 3 теоретических вопроса. Такая структура и содержание экзаменационного билета позволяет контролировать как усвоение учащимися учебного материала, так и сформированность умений его применять</p> <p>Перечень вопросов для экзамена</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Области применения ЭВМ в химической технологии 2. Математическое моделирование химико-технологических процессов. Виды моделирования 3. Основные виды математических моделей 4. Выбор и построение модели процесса 5. Этапы составления математического описания 6. Состав математического описания 7. Моделирующий алгоритм 8. Установление адекватности математических моделей реальным объектам 9. Способы построения математических моделей 10. Математическое описание структуры потоков в аппарате. Методы исследования структуры потоков. Импульсный метод исследования структуры потоков 11. Математическое описание структуры потоков в аппарате. Методы исследования структуры потоков. Метод ступенчатого возмущения 12. Основные характеристики распределения элементов потока по времени пребывания в аппарате (моменты функции распределения) 13. Типовые структуры математические модели потоков в аппаратах. Модель идеального вытеснения 14. Модель идеального смешения

15. Диффузионная модель
16. Ячеечная модель
17. Составление математических моделей экспериментальным методом. Математические модели, составленные экспериментально-статистическим методом
18. Параметрическая идентификация моделей методом наименьших квадратов
19. Регрессионный анализ. Проверка воспроизводимости опытов
20. Оценка значимости коэффициентов уравнения регрессии
21. Проверка адекватности модели
22. Корреляционный анализ. Коэффициент корреляции
23. Частный коэффициент корреляции
24. Множественный коэффициент корреляции
25. Методы оптимизации химико-технологических процессов и нахождения экстремума (минимума или максимума) функций. Поисковые методы для функции одной переменной. Метод сканирования
26. Метод дихотомии (половинного деления)
27. Метод золотого сечения

Образец экзаменационного билета

Стерлитамакский филиал федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный университет»

Факультет: Естественнонаучный
 Кафедра: Химии и химической технологии
 Дисциплина: Математические методы в органической химии
 Учебный год: 2019-2020 г.

Билет № 5

1. Методы оптимизации химико-технологических процессов и нахождения экстремума (минимума или максимума) функций. Поисковые методы для функции одной переменной. Метод золотого сечения.
2. Типовые математические модели структуры потоков в аппаратах. Модель идеального вытеснения. Диффузионная модель.
3. Этапы определения воспроизводимости опытов.

Зав. кафедрой
 Абдрашитов Я.М..

		<p>Критериями оценивания при модульно-рейтинговой системе являются баллы, которые выставляются преподавателем за виды деятельности (оценочные средства) по итогам изучения модулей (разделов дисциплины), перечисленных в рейтинг-плане дисциплины (для экзамена: текущий контроль – максимум 40 баллов; рубежный контроль – максимум 30 баллов, поощрительные баллы – максимум 10; для зачета: текущий контроль – максимум 50 баллов; рубежный контроль – максимум 50 баллов, поощрительные баллы – максимум 10).</p> <p>Шкалы оценивания: (для экзамена: от 45 до 59 баллов – «удовлетворительно»; от 60 до 79 баллов – «хорошо»; от 80 баллов – «отлично».</p>
--	--	---