

## Методичні вказівки з організації самостійної роботи з дисципліни «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології»

У підготовці бакалаврів за спеціальністю “Хімічна технологія та інженерія” (освітня програма «Хімічні технології та інженерія», вибірковий блок «Хімічні технології харчових добавок та косметичних засобів») дисципліна «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології» є важливим курсом, мета якого полягає у підготовці для виробничо-технологічної діяльності, що передбачає знання принципів моделювання і особливо оптимізації об'єктів хімічної технології.

**Основними завданнями** вивчення дисципліни «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології» є підготовка студентів-бакалаврів до виконання обов'язків у виробничо-технологічній галузі, що передбачає розуміння сутності математичного моделювання, принципів створення різного типу моделей, формування у студентів теоретичних знань щодо розроблених стандартних моделей макро- та макрокінетики хімічних реакцій, стандартних моделей гідродинаміки, та практичних знань щодо використання стандартних моделей, їх вдосконалення та пристосування для конкретних об'єктів, а також проведення розрахунків матеріального та теплового балансів.

**В результаті вивчення дисциплін студент повинен знати:**

- основні принципи математичного моделювання;
- алгоритм та правила складання математичних моделей;
- опис математичних моделей стехіометрії, термодинаміки та кінетики хімічних реакцій;
- опис стандартних гідродинамічних математичних моделей хімічних реакцій;
- основні принципи та методи оптимізації;

**В результаті вивчення дисциплін студент повинен вміти:**

- записати математичну модель стехіометрії, термодинаміки та кінетики хімічних реакцій;
- скласти алгоритм розрахунку матеріального балансу виробництва, та реалізувати його програмними засобами MS Excel;
- обґрунтувати вибір критерію оптимізації та визначити метод та алгоритм оптимізації.

### Теми лекційних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1.	<b>Основні принципи математичного моделювання, класифікації моделей.</b> Основні поняття моделювання. Класифікація моделей, особливості фізичних та математичних моделей. Етапи та алгоритм складання математичних моделей. Вимоги до	4

	математичних моделей, верифікація т. перевірка моделей.	
2.	<b>Математичне моделі стехіометрії, термодинаміки та кінетики хімічних реакцій.</b> Загальні дані щодо математичного опису хімічних реакцій, формулювання прямої та зворотної кінетичної задачі. Математичний опис стехіометрії хімічних реакцій. Математична модель кінетики хімічних реакцій, в тому числі кінетики каталітичних реакцій.	4
3.	<b>Стандартні математичні моделі гідродинаміки хімічних реакторів.</b> Основні критерії оцінки моделей гідродинаміки. Модель ідеального змішування. Модель ідеального витіснення. Комірчиста модель. Однопараметрична дифузійна модель. Комбінована модель ідеального змішування з проскоком та застоюною зоною	4
4.	<b>Принципи та методи оптимізації.</b> Основи поняття оптимізації. Критерій оптимізації, принципи вибору. Одновимірні та багатовимірні оптимізації. Методи та алгоритми оптимізації. Градієнтні та безградієнтні методи.	4

### Теми лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1.	Розробка математичної моделі матеріального балансу виробництва косметичного засобу.	8
2.	Реалізація розробленої моделі матеріального балансу виробництва одного із косметичних засобів засобами MS Excel або подібних програм	24
3.	Розрахунок одновимірної оптимізації	8

### Самостійна робота

Проробка окремих тем (розділів), які не вивчаються при проведенні лекційних, лабораторних та практичних занять:

**1. Оптимізація при наявності декількох екстремумів критерію оптимізації.** Цільова функція із двома екстремумами. Причини виникнення. Методи оптимізації у випадку наявності двох екстремумів у випадку одновимірної та двовимірної оптимізації. Поліекстремальна цільова функція. Способи визначення основного оптимуму критерія оптимізації.

**Основні аспекти самостійної роботи з дисципліни «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології»**

Дисципліна «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології» має практичне спрямування та має на меті формування у студентів-бакалаврів знань та навичок, які необхідні для проведення науково-дослідних та інженерно-конструкторських робіт. Це пов'язано з тим, що ефективність вивчення дисципліни може бути високою лише при умові одночасного формування навичок використання знань при вирішенні конкретних наукових або технічних завдань.

Особливу увагу при вивченні дисципліни «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології» студентам необхідно приділити методології пошуку інформації, особливо в електронних ресурсах, в мережі Internet.

Іншим суттєвим аспектом вивчення дисципліни «Математичне моделювання та оптимізація об'єктів хімічної технології» є формування навичок розробки математичних моделей початкового та середнього рівня та реалізація розроблених математичних моделей програмними засобами за допомогою доступних програм. Прикладом математичної моделі є математична модель матеріального балансу виробництва одного із косметичних засобів.

## **ПИТАННЯ ДО САМОСТІЙНОЇ ТА КОНТРОЛЬНОЇ РОБОТИ**

1. Класифікація математичних моделей. Вимоги до математичних моделей.
2. Алгоритм створення математичних моделей.
3. Методи математичного моделювання.
4. Моделі кінетики та термодинаміки хімічних реакцій.
5. Моделі гідродинаміки ректорів. Модель ідеального витіснення.
6. Моделі гідродинаміки ректорів. Модель ідеального змішування.
7. Моделі гідродинаміки ректорів. Комірчиста модель.
8. Моделі гідродинаміки ректорів. Однопараметрична дифузійна модель.
9. Моделі гідродинаміки ректорів. Модель ідеального змішування із проскоком та застійною зоною.
10. Поняття оптимізації Критерій оптимізації та вимоги до нього.
11. Двовимірна оптимізація. Градієнтні методи.
12. Двовимірна оптимізація. Безградієнтні методи.

## **РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА**

1. Закгейм А.Ю. Введение в моделирование химико-технологических процессов. -2-е изд., переработанное и дополненное. – М.: Химия. – 1982. – 288 с.
2. Брановицька С.В., Медведєв Р.Б., Фіалков Ю.А. Обчислювальна математика та програмування. Обчислювальна математика в хімії та хімічній технології: підручник для студентів ВНЗ. – К.: Політехніка НТУУ «КПІ», 2004. – 220 с.
3. Басюк Т.М., Думанський Н.О., Пасічник О.В. Основи інформаційних технологій: Навчальний посібник. Львів:Новий Світ-2000. – 2012 . – 390 с.

4. Деркач Т.М. Інформаційні технології у викладанні хімічних дисциплін: Навчально-методичний посібник.- Дніпропетровськ: ДНУ, 2008.- 336 с.
5. Математичні методи в хімію Підручник для студентів хімічних спеціальностей ВНЗ. К: Либідь. – 2005. – 256 с
6. Островский Г.М., Волин Ю.М., Зиятдинов Н.Н. Методы оптимизации химико-технологических процессов: Учебное пособие. – М: КДУ. – 2008. – 424 с.
7. Гумеров Ас.М., Валеев Н.Н, Гумеров Аз.М., Емельянов В.М. Математическое моделирование химико-технологических процес сов: Учебное пособие. – М.: КолосС. – 2008. – 159 с.
8. Гартман Т.Н., Клушин Д.В. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: Учебное пособие для ВУЗов. – М.: ИКЦ «Академкнига». – 2006. – 416 с
1. Брановицькая С.В., Медведев Р.Б., Фиалков Ю.А. Вычислительная математика в химии и химической технологии: Учебн. Для хим.-технолог. спец. вузов. – К.: Вища школа, 1986 г. – 215 с.
2. Волкова С.А., Байбуз О.Г., Приставка О.П., Федякін О.І. Детерміновані стохастичні методи дослідження надійності технічних систем – Дніпропетровськ,: ДВНЗ УДХТУ. – 2014.
3. Томашевський В.М., Жданова Т.Г., Жолдаков О.О. Вирішення практичних завдань методами комп'ютерного моделювання: Навчальний посібник. К: Корнійчук . – 2001 . – 268 с.
4. Гольцева Л.В., Козлов А.В., Полосин А.Н. Математическое моделирование химико-технологических процес сов. Базовій курс: учебное пособие. СПб.: СПбГТИ(ТУ). – 2012. – 86 с
5. Холоднов В.А., Решетиловский В.П., Лебедева М.Ю., Боровинская Е.С. Системный анализ и принятие решений. Компьютерное моделирование и оптимизация объектов химической технологии в MATHCAD И EXCEL: Учебное пособие. СПбГТИ(ТУ). – 2007. –425 с