

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Юго-Западный государственный университет»
(ЮЗГУ)

Кафедра фундаментальной химии и химической технологии



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе

О.Г. Локтионова

2016 г.

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ХИМИИ

Методические указания по выполнению самостоятельной работы
для студентов направления подготовки 04.03.01 Химия
и специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Курск 2016

УДК 66.048

Составитель: А.В. Лысенко

Рецензент

Доктор химических наук, профессор *Л.М. Миронович*

Математические методы в химии: методические указания по выполнению самостоятельной работы студентов / Юго-Зап. гос. ун-т; сост.: А.В. Лысенко. Курск, 2016, 23 с.: ил., 1 табл. Библиогр.:19 с.

Методические указания по выполнению самостоятельной работы студентов предназначены для углубленного изучения дисциплины «Математические методы в химии» во внеаудиторное время.

Содержат основные сведения об организации самостоятельной работы студентов. Описаны основные виды самостоятельной работы. Приведены темы для самостоятельного изучения, рекомендуемые темы рефератов и докладов, а также тестовые задания и задачи по изучаемым разделам. Представлены требования, предъявляемые к оформлению и структуре рефератов.

Методические указания предназначены для студентов направления подготовки 04.04.01 Химия и специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Текст печатается в авторской редакции

Подписано в печать *20.01.16* Форма 60x84 1/16.

Усл. печ. л. *1,2* Уч.-изд.л. *1,1* Тираж 100 экз. Заказ *24* Бесплатно
Юго-Западный государственный университет.
305040, г. Курск, ул. 50 лет Октября, 94.

Содержание

Введение	4
1 Организация самостоятельной работы студентов	5
2 Виды самостоятельной работы, их характеристика	6
3 Общие требования к оформлению реферата	9
4 Требования к структуре реферата	9
5 Порядок сдачи и защиты рефератов и докладов	11
6 Использование тестовых задания для самопроверки	12
7 Методические рекомендации по подготовке к практическим занятиям и зачету	15
Список использованных источников	19
Приложение А Рекомендуемые темы докладов	20
Приложение Б Рекомендуемые темы рефератов	21
Приложение В Оформление титульного листа реферата	22
Приложение Г Перечень вопросов к зачету	23

Введение

В современный период востребованы высокий уровень знаний, академическая и социальная мобильность, профессионализм специалистов, готовность к самообразованию и самосовершенствованию. В связи с этим должны измениться подходы к планированию, организации учебно-воспитательной работы, в том числе и самостоятельной работы студентов.

Прежде всего, это касается изменения характера и содержания учебного процесса, переноса акцента на самостоятельный вид деятельности, который является не просто самоцелью, а средством достижения глубоких и прочных знаний, инструментом формирования у студентов активности и самостоятельности.

Целью методических рекомендаций является повышение эффективности учебного процесса, в том числе благодаря самостоятельной работе, в которой студент становится активным субъектом обучения, что означает:

- способность занимать в обучении активную позицию;
- готовность мобилизовать интеллектуальные и волевые усилия для достижения учебных целей;
- умение проектировать, планировать и прогнозировать учебную деятельность;
- привычку инициировать свою познавательную деятельность на основе внутренней положительной мотивации;
- осознание своих потенциальных учебных возможностей и психологическую готовность составить программу действий по саморазвитию.

Данные методические указания по выполнению самостоятельной работы студентов предназначены для углубленного изучения дисциплины «Математические методы в химии» во внеаудиторное время.

1 Организация самостоятельной работы студентов

Самостоятельная работа - планируемая учебная, учебно-исследовательская, научно-исследовательская работа студентов, выполняемая во внеаудиторное время по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия.

Самостоятельная работа студентов (далее СРС) является важным видом учебной и научной деятельности студента. Самостоятельная работа студентов играет значительную роль в рейтинговой технологии обучения.

Формы самостоятельной работы студентов разнообразны. Они включают в себя:

- изучение и систематизацию официальных государственных документов: методических, нормативно-технических и справочных материалов с использованием информационно-поисковых систем, в частности глобальной сети «Интернет»;

- изучение учебной, научной и методической литературы, материалов периодических изданий с привлечением электронных средств официальной, статистической, периодической и научной информации;

- подготовку докладов и рефератов;

- участие в работе студенческих конференций, научных исследованиях.

Самостоятельная работа приобщает студентов к научному творчеству, поиску и решению актуальных современных проблем.

При организации СРС важным и необходимым условием становятся формирование умения самостоятельной работы для приобретения знаний, навыков и возможности организации учебной и научной деятельности.

Содержание самостоятельной работы студентов по дисциплине «Математические методы в химии» представлено в таблице 1.

Таблица 1 - Самостоятельная работа студентов по дисциплине «Математические методы в химии»

№	Наименование раздела дисциплины	Срок выполнения	Время, затрачиваемое на выполнение СРС, час	Вид СРС
1	Теория подобия как теоретическая база физического моделирования	1-8 неделя	16	тестовые задания
2	Методы моделирования химико-технологических процессов	9-10 неделя	10	доклад
3	Гидродинамические процессы. Математическое моделирование гидродинамической структуры однофазных потоков	11-14 неделя	16	реферат
4	Модели неидеальных потоков. Влияние параметра n на степень превращения. Влияние секционирования на селективность	15-18 неделя	12	задачи
Итого			54	

В таблице 1 в столбце 1 указан номер раздела дисциплины, по которому предусмотрена СРС, а в столбце 2 указано наименование раздела. В столбце 3 указан временной интервал, в который студенту необходимо выполнить СРС по данному разделу. В столбце 4 указано время, затрачиваемое студентом на выполнение СРС, которое рассчитывается преподавателем. В столбце 5 указан вид СРС, который необходимо выполнить студенту во внеаудиторное время.

2 Виды самостоятельной работы, их характеристика

При изучении дисциплины «Математические методы в химии» студентам рекомендуется самостоятельно выполнять доклады и рефераты. Данные виды интеллектуальной практической деятельности способствуют выработке умения и привычки делать

что-либо правильно, а также закреплению навыков и знаний по проблеме.

Доклад - это вид самостоятельной работы студентов, заключающийся в разработке студентами темы на основе изучения литературы и развернутом публичном сообщении по данной проблеме.

Отличительными признаками доклада являются:

- передача в устной форме информации;
- публичный характер выступления;
- стилевая однородность доклада;
- четкие формулировки и сотрудничество докладчика и аудитории;
- умение в сжатой форме изложить ключевые положения исследуемого вопроса и сделать выводы.

Перечень тем докладов, рекомендованных студентам при изучении дисциплины «Математические методы в химии» представлен в приложении А.

Реферат - краткое изложение содержания документа или его части, научной работы, включающее основные фактические сведения и выводы, необходимые для первоначального ознакомления с источниками и определения целесообразности обращения к ним.

В учебном процессе реферат представляет собой письменный доклад по определенной теме, в котором собрана информация из одного или нескольких источников.

Рефераты пишутся обычно стандартным языком, с использованием ряда речевых оборотов: «важное значение имеет», «уделяется особое внимание», «поднимается вопрос», «делаем следующие выводы», «исследуемая проблема», «освещаемый вопрос» и т.п.

Цель реферата - не только сообщить о содержании реферируемой работы, но и дать представление о вновь возникших проблемах соответствующей отрасли науки.

В зависимости от количества реферируемых источников выделяют следующие виды рефератов:

монографические – рефераты, написанные на основе одного источника;

обзорные - рефераты, созданные на основе нескольких исходных текстов, объединенных общей темой и сходными проблемами исследования.

Рефераты оцениваются по следующим критериями:

- актуальность содержания, высокий теоретический уровень, глубина и полнота анализа фактов, явлений, проблем, относящихся к теме;

- информационная насыщенность, новизна, оригинальность изложения вопросов;

- простота и доходчивость изложения;

- структурная организованность, логичность, грамматическая правильность и стилистическая выразительность;

- убедительность, аргументированность, практическая значимость и теоретическая обоснованность предложений и выводов.

Признаки реферата:

- реферат не копирует дословно содержание первоисточника, а представляет собой новый вторичный текст, создаваемый в результате систематизации и обобщения материала первоисточника, его аналитико-синтетической переработки.

- будучи вторичным текстом, реферат составляется в соответствии со всеми требованиями, предъявляемыми к связанному высказыванию: так ему присущи следующие категории: оптимальное соотношение и завершенность (смысловая и жанрово-композиционная). Для реферата отбирается информация, объективно-ценная для всех читающих, а не только для одного автора. Автор реферата не может пользоваться только ему понятными значками или сокращениями.

- работа, проводимая автором для подготовки реферата должна обязательно включать самостоятельное мини-исследование, осуществляемое студентом.

- организация и описание исследования представляет собой очень сложный вид интеллектуальной деятельности, требующий культуры научного мышления, знания методики проведения исследования, навыков оформления научного труда и т.д.

Современные требования к реферату - точность и объективность в передаче сведений, полнота отображения основных элементов, как по содержанию, так и по форме.

При изучении дисциплины «Математические методы в химии» студентам рекомендованы темы рефератов, представленные в приложении Б.

3 Общие требования к оформлению реферата

Рефераты должны оформляться в соответствии с действующими системами стандартов на оформление технической и отчетной документации, приведенных в СТУ 04.02.030-2008.

Изложение материала при подготовке реферата должно быть чётким, кратким и профессионально грамотным. Переписывание известных материалов из книг, справочников и других источников без ссылок на источники **не допускается**.

Каждый структурный элемент реферата нужно начинать с нового листа. Название структурного элемента в виде заголовка записывают строчными буквами, начиная с первой прописной.

Реферат должен быть написан на листах белой писчей бумаги форматом А4 (210×297 мм) с одной стороны листа с применением печатающих или графических устройств вывода ЭВМ через 1,5 интервала.

Рекомендуется использовать гарнитуру шрифта TimeNewRoman - 14.

При печати текстового документа следует использовать двухстороннее выравнивание.

Устанавливаемые размеры полей: левое - не менее 30 мм, правое - не менее 10 мм, верхнее и нижнее - не менее 20 мм.

Абзацный отступ выполняется одинаковым по всему тексту документа и равен пяти знакам (15-17 мм).

4 Требования к структуре реферата

При оформлении реферата рекомендуется придерживаться следующей структуры:

Титульный лист

Является первой страницей и заполняется по строго определенным правилам. Оформление титульного листа реферата представлено в Приложении В.

Содержание

Содержание включает введение, заголовки всех разделов, подразделов, пунктов, заключение, список использованных источников и наименования приложений с указанием номеров страниц, с которых начинаются эти элементы.

Введение

Введение - это вступительная часть реферата, предваряющая текст. Оно должно содержать следующие элементы:

- очень краткий анализ научных, экспериментальных или практических достижений в той области, которой посвящен реферат;
- общий обзор опубликованных работ, рассматриваемых в реферате;
- цель данной работы;
- задачи, требующие решения.

Объем введения при объеме реферата 20-25 может составлять одну страницу.

Основная часть

В основной части реферата студент дает письменное изложение материала по предложенному плану, используя материал из источников. В этом разделе работы формулируются основные понятия, их содержание, подходы к анализу, существующие в литературе, точки зрения на суть проблемы, ее характеристики.

Текст основной части делят на разделы, подразделы, пункты и подпункты. При этом необходимо, чтобы каждая часть содержала законченную информацию. Разделы, подразделы, пункты и подпункты нумеруются арабскими цифрами и записываются с абзацного отступа.

В соответствии с поставленной задачей делаются выводы и обобщения.

Очень важно не повторять, не копировать стиль источников, а выработать свой собственный, который соответствует характеру реферируемого материала.

Заключение

Заключение подводит итог работы. Оно может включать повтор основных тезисов работы, чтобы акцентировать на них внимание читателей, содержать общий вывод, к которому пришел автор реферата, предложения по дальнейшей научной разработке вопроса и т.п. Здесь уже никакие конкретные случаи, факты, цифры не анализируются. Заключение по объему, как правило, должно быть меньше введения.

Список использованных источников

В список включают все источники, на которые имеются ссылки в реферате: официальные материалы, монографии и энциклопедии, книги и документы, журналы, брошюры и газетные статьи.

Источники в списке располагают и нумеруют в порядке их упоминания в тексте реферата арабскими цифрами без точки.

Сведения об источниках приводят в соответствии с требованиями ГОСТ 7.1 и ГОСТ 7.82.

Приложения

В приложения выносятся: графический материал большого объема и формата, таблицы большого формата, методы расчетов, описания аппаратуры и приборов, описания алгоритмов и программ задач, решаемых на ЭВМ, и т. д.

В них рекомендуется включать материалы иллюстрационного и вспомогательного характера:

- таблицы и рисунки большого формата;
- дополнительные расчеты;
- описания применяемого в работе нестандартного оборудования.

5 Порядок сдачи и защиты рефератов и докладов

Реферат или доклад сдается на проверку преподавателю за 2 недели до его защиты.

При защите реферата преподаватель учитывает:

- качество написания;

- степень самостоятельности студента и проявленную инициативу;

- связность, логичность и грамотность составления;

- оформление в соответствии с требованиями ГОСТ.

Защита тематического реферата может проводиться на выделенном одном занятии в рамках часов учебной дисциплины или конференции или по одному реферату при изучении соответствующей темы, либо по договоренности с преподавателем.

Защита реферата или доклада студентом предусматривает:

- доклад продолжительностью не более 5-8 минут;

- ответы на вопросы оппонента.

На защите **запрещено** чтение текста реферата или доклада.

6 Использование тестовых задания для самопроверки

Важным критерием усвоения теоретического материала является умение пройти тестирование по пройденному ранее материалу. Тестовые задания ориентированы в целом на проверку имеющихся проблем, способствуют систематизации изученного материала, проверке качества его усвоения. При использовании тестовых задания для самопроверки студент повторяет, как правило, ранее изученный материал. В этот период сыграют большую роль правильно подготовленные заранее записи и конспекты. Студенту останется лишь повторить пройденное, учесть, что было пропущено, восполнить пробелы и закрепить ранее изученный материал.

Тестовые задания для самопроверки по теме «Теория подобия как теоретическая база физического моделирования» представлены ниже:

1. Какое уравнение используется для определения частных коэффициентов скорости абсорбции для газовой фазы ...

$$а. K_r = f_1 \frac{D_r}{d} Re_\Gamma^k Pr_r^l \left(\frac{d}{h}\right)^m ; б. K_r = f_2 \frac{D_2}{d} Re_\Gamma^k Pr_r^l \left(\frac{d}{h}\right)^q ;$$

$$в. K_r = \varphi \frac{D_2}{d} Re_t Pr_t \left(\frac{d}{h}\right)^t ; г. K_r = f_2 \frac{D_2}{d} Re_t Pr_t \left(\frac{d}{h}\right)^t .$$

2. Какую величину можно найти с помощью уравнения ...

$$K = \frac{1}{\frac{1}{f_1 \frac{D_r}{d} Re_\Gamma^k Pr_\Gamma^l \left(\frac{d}{h}\right)^m \frac{3600M}{22,4 \cdot 760}} + \frac{1}{f_2 \frac{D_{ж}}{d} Re_{ж}^n Pr_{ж}^p \left(\frac{d}{h}\right)^q \frac{3600H}{760}}}$$

а. общий коэффициент абсорбции; б. число Рейнольда для газа;

в. кинематическую вязкость жидкости; г. константу Генри.

3. В чем измеряется коэффициент диффузии?

а. кг/м²·ч·мм.рт.ст.; б. мм рт.ст;

в. м²/сек; г. Па.;

4. Число Рейнольдса для жидкости можно найти...

а. $Re = \frac{\omega_r d}{\vartheta_{ж}}$; б. $Re = \frac{\omega_{ж} d}{\vartheta_{ж}}$; в. $Re = \frac{\omega_r d}{D_{ж}}$; г. $Re = \frac{\vartheta_{ж}}{D_{ж}}$.

5. Число Прандтля для газа определяется по формуле...

а. $Pr_r = \frac{\omega_r d}{\vartheta_r}$; б. $Pr_r = \frac{\omega_{ж} d}{\vartheta_{ж}}$; в. $Pr_r = \frac{\vartheta_r}{D_r}$; г. $Pr_r = \frac{\vartheta_r}{D_{ж}} d$.

6. Критерий Сантона (St) равен ...

а. $\frac{Nu}{Re \cdot Pr}$; б. $\frac{q}{\gamma \omega_0 c_p}$; в. $\frac{\alpha}{\gamma \omega_0 c_p}$; г. $\frac{\omega_0}{k_0}$.

7. Скорость звука в газе при температуре t_{ср} равна ...

а. $a_0 = \sqrt{\gamma t_{ср}}$; б. $a_0 = \sqrt{\gamma R I_{ср}}$; в. $a_0 = \sqrt{\gamma R t_{ср}}$; г. $a_0 = \sqrt{R t_{ср}}$.

8. Если произведение Gr·Pr > 109, то критерий Нуссельта для газов равен ...

а. Nu = 0,17Gr^{1/3}·Pr^{1/3};

б. Nu = 0,56Gr^{1/4}·Pr^{1/4};

в. Nu = 0,47Gr^{1/4}·Pr^{1/4};

г. Nu = 0,12Gr^{1/3}·Pr^{1/3}.

9. Обратное число Рейнольдса можно найти по формуле ...

а. $\pi_2 = \frac{\mu}{\gamma d^2}$; б. $\pi_2 = \frac{n}{\gamma \mu d^2}$; в. $\pi_2 = \frac{\mu}{\gamma n d^2}$; г. $\pi_2 = \frac{\mu}{\gamma n d}$.

10. Формула коэффициента расхода энергии...

а. $\pi_1 = \frac{N}{\gamma n^2 d^5}$; б. $\pi_1 = \frac{N}{\gamma n^3 d^5}$; в. $\pi_1 = \frac{N}{\gamma n^3 d}$; г. $\pi_1 = \frac{\gamma N}{n^3 d^5}$.

11. Теория подобия – это ...

а. наука, где естественный или искусственный объект, находится в соответствии с изучаемым объектом или с какой-либо из его сторон;

б. наука о подобии процессов;

в. учение о подобии явлений;

г. учение, выражающие отношение различных одноименных величин в объекте и модели.

12. Треугольники подобны, если ...

а. их соответственные углы равны, а сходственные стороны пропорциональны;

б. если их соответственные углы пропорциональны, а сходственные стороны равны;

в. если их соответственные углы и сходственные стороны равны;

г. если их соответственные углы сходственные стороны пропорциональны.

13. Математическая формулировка геометрического подобия двух треугольников...

а. $\frac{l_1'}{l_1} = \frac{l_2'}{l_2} = \frac{l_3'}{l_3} = A$; б. $\frac{l_1}{l_1'} = \frac{l_2}{l_2'} = \frac{l_3}{l_3'} = A$;

в. $\frac{l_1'}{l_1} = \frac{l_2'}{l_2} = \frac{l_3'}{l_3} = 1$; г. $\frac{w'}{w} = Aw$.

14. Инварианта подобия обозначаются символом ...

а. i ; б. g ; в. a ; г. u ;

15. Симплексами подобия называются инварианты подобия, являющиеся отношением ...

а. простых однородных величин;

б. сложных однородных величин;

в. простых неоднородных величин;

г. сложных неоднородных величин.

16. Критерии подобия могут быть ...

а. комплексными и простыми;

б. простыми и сложными;

в. основными и производными;

г. определяющими и неопределяющими.

17. Критериями подобия могут называются инварианты подобия, выраженные ...

а. более сложными безразмерными отношениями, составленными из нескольких простых параметров;

б. более сложными размерными отношениями, составленными из нескольких простых параметров;

в. более сложными безразмерными отношениями, составленными из нескольких сложных параметров;

г. сложными безразмерными отношениями, составленными из нескольких простых величин.

18. Критерии, содержащие искомую величину, называются ...
 а. неопределяющими; б. определяющими;
 в. побочными; г. искомыми.
19. Какие критерии являются определяющими?
 а. величины заданы наперед условиями однозначности;
 б. величины неизвестны;
 в. критерии, содержат искомую величину;
 г. величины заданы некоторыми условиями.
20. Что лежит в основе теории подобия?
 а. три теоремы; б. две теоремы;
 в. четыре леммы; г. 3 леммы.
21. Какой критерий зависит от геометрической формы аппарата?
 а. Прандля; б. Нуссельта;
 в. Пекле; г. Рейнольдса.
22. Критерий Прандля это ...
 а. $Pr = \frac{Pe}{Re} = \frac{\frac{\omega t}{\alpha}}{\frac{\omega t}{\vartheta}} = \frac{\vartheta}{\alpha}$; б. $Nu = f_0(Re, Gr, Pr)$;
 в. $\alpha = \frac{\lambda}{l} Nu = \frac{\lambda}{l} f_2\left(\frac{l}{l_0}, Re, Pr, Gr\right)$; г. $C_l = C Pr^m Gr^r \left(\frac{l}{l_0}\right)^q$.
23. $Nu = \frac{\alpha l}{\lambda}$ это критерий ...
 а. Пекле; б. Нуссельта; в. Прандля; г. Нишина.
24. Зависимость между Re и Nu выражается уравнением...
 а. $Nu = C Re^n$; б. $lg Nu = lg C + n * lg Re$;
 в. $C = \frac{Nu}{Re^n}$; г. $lg Nu = lg C_k + n * lg Re$.
25. От каких значений зависит критерий Нуссельта?
 а. λ, c, ρ, μ ; б. ρ, λ, μ ; в. m, r и q ; г. Re, Gr, Pe .
26. Условием теплового подобия для модели и производственного аппарата является:
 а. $\frac{\omega l}{\alpha} = \frac{\omega' l'}{\alpha'} = Pe$; б. $Pe = idem$;
 в. $A_\alpha = \frac{A_\lambda}{A_l}$; г. $\frac{\alpha l}{\lambda} = \frac{\alpha' l'}{\lambda'}$.
27. $Fr = \frac{gl}{\omega^2}$ это критерий ...
 а. Фейлера; б. Фернольда; в. Фруда; г. Франкфурда.

7 Методические рекомендации по подготовке к практическим занятиям и зачету

Приступая к изучению новой учебной дисциплины, студенты должны ознакомиться с учебной программой, учебной, научной и методической литературой, имеющейся в библиотеке, получить в библиотеке рекомендованные учебники и учебно-методические пособия.

При подготовке к практическим занятиям следует в полной мере использовать курсы учебников, рекомендованных преподавателем. Это даст более углубленное представление о проблемах, получивших систематическое изложение в учебнике. Рекомендуется самостоятельно изучить задачи по теме «Модели неидеальных потоков»

Пример 1. Влияние параметра n на степень превращения

Рассчитаем по формуле (1) степень превращения при $kt = 6$ для ячеечной модели при разных n . Первый и последний расчеты относятся к идеальным аппаратам.

$$x = 1 - \frac{1}{\left(1 + \frac{6}{n}\right)^n} \quad (1)$$

$$n=1 \quad x = 1 - \frac{1}{1+6} = 0,857$$

$$n=2 \quad x = 1 - \frac{1}{\left(1 + \frac{6}{2}\right)^2} = 0,938$$

$$n=3 \quad x = 1 - \frac{1}{\left(1 + \frac{6}{3}\right)^3} = 0,963$$

$$n=6 \quad x = 1 - \frac{1}{\left(1 + \frac{6}{6}\right)^6} = 0,984$$

$$n \rightarrow \infty \quad x = 1 - e^{-6} = 0,996$$

Пример 1 показывает, что с ростом числа ячеек степень превращения довольно быстро приближается к результатам, характерным для идеального вытеснения. Ясно, почему в технологии часто применяется прием **секционирования**: аппараты, в которых создается интенсивное смешение потока, делят на

последовательные секции, между которыми жидкость перетекает по возможности без смешения. Для этого обычно служат всякого рода перфорированные перегородки. Иногда для достижения того же эффекта применяют каскады последовательно соединенных аппаратов с мешалками.

Кроме увеличения степени превращения, секционирование влияет и на другие показатели процесса, в частности, на селективность.

Пример 2. Влияние секционирования на селективность

Выведем формулу для расчета селективности при протекании в аппарате, описываемом ячеечной моделью, последовательной реакции ($k_1=k_2=k$).

Для сокращения выкладок обозначим $q=kt^{-}/n$. Тогда для i -той ячейки аппарата, содержащего n ячеек, получим

$$c_{At} = \frac{c_A}{(1+q)^i} \quad (2)$$

Рассмотрим баланс по В для ряда ячеек.

Первая ячейка

$$-c_{B_1} + qc_{A_1} - qc_{B_1} = 0$$

Откуда, с учетом значения c_{A_1} из формулы (2), получим

$$c_{B_1} = \frac{qc_{A_1}}{1+q} = \frac{qc_{A_0}}{(1+q)^2} \quad (3)$$

Вторая ячейка

$$c_{B_1} - c_{B_2} + qc_{A_2} - qc_{B_2} = 0$$

Откуда, используя формулы (2) и (3) получим

$$c_{B_2} = \frac{c_{B_1} + qc_{A_2}}{1+q} = \frac{2qc_{A_0}}{(1+q)^3} \quad (4)$$

Третья ячейка

$$c_{B_2} - c_{B_3} + qc_{A_3} - qc_{B_3} = 0$$

Откуда, используя формулы (2) и (4), получим

$$c_{B_3} = \frac{3qc_{A_0}}{(1+q)^4}$$

Методом индукции легко получить

$$c_{B_i} = \frac{iqc_{A_0}}{(1+q)^{i+1}}$$

Или для последней, n-й ячейки

$$c_{B_n} = \frac{nqc_{A_0}}{(1+q)^{n+1}} \quad (5)$$

Используя уравнение (2) и (5), получим выражение для селективности

$$\sigma = \frac{c_{B_n}}{c_{A_0} - c_{A_n}} = \frac{nq}{(1+q)[(1+q)^n - 1]}$$

Или после подстановки значения q

$$\sigma = \frac{k\bar{t}}{\left(1 + \frac{k\bar{t}}{n}\right) \left[\left(1 + \frac{k\bar{t}}{n}\right)^n - 1\right]} \quad 6$$

Так, например, для $k\bar{t} = 0,5$ получим такой ряд значений:

n.....	1	2	4	6	10	∞
x.....	0,333	0,360	0,376	0,381	0,386	0,394
σ	0,667	0,711	0,739	0,749	0,757	0,770

Таким образом, и в этом случае несомненна целесообразность секционирования аппарата: растет как степень превращения, так и селективность.

Основная функция зачёта - обучающая, и только потом оценочная и воспитательная. Зачёт позволяет выработать ответственность, трудолюбие, принципиальность.

Серьезная и методически грамотная подготовка к практическим занятиям, написание докладов и рефератов значительно облегчит подготовку к зачёту.

Перечень вопросов к зачёту по дисциплине «Математические методы в химии» представлен в приложении Г.

Список использованных источников

1. **Абасов, З.** Проектирование и организация самостоятельной работы студентов [Текст]: /Абасов, З. //Высшее образование в России. 2007. №10. С. 17.

2. **Гумеров, А.М.** Математическое моделирование химико-технологических процессов[Текст]: учебное пособие /А.М. Гумеров. Изд. 2-е, перераб. Санкт-Петербург: Лань, 2014. 176 с.

3. **Жураковский, В.В.** Управление самостоятельной работой: мировой опыт[Текст]: / В.В. Жураковский // Высшее образование в России. 2003. № 2. С. 45-50.

4. **Захарова, А.А.** Процессы и аппараты химической технологии[Текст]:/ А.А.Захарова [и др.]; М., Академия. 2006. 528 с.

5. **Математическое моделирование химико-технологических процессов**[Текст]: учеб. пособие. М.: КолосС, 2008. 159 с.

6. **Процессы и аппараты химической технологии. Явления переноса, макрокинетика, подобие, моделирование, проектирование**[Текст]: учеб. пособие. / под ред. А.М. Кутепова. Т. 2: Механические и гидромеханические процессы. М.: Логос. 2002. 600 с.

7. **Скатецкий, В.Г.** Математические методы в химии [Текст]: учеб. /В.Г.Скатецкий, Д.В.Свиридов, В.И. Яшкин.М., ТетраСистемс. 2006. 368 с.

8. **Самарский, А.А.** Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры / А.А. Самарский, А.П. Михайлов; 2-е изд., испр. М.: Физматлит, 2005. 320 с.

9. **Флореа, О.** Расчёты по процессам и аппаратам химической технологии[Текст]: учеб. / О.Флореа,О.Смигельский; М.: Химия.1971. 448 с

Приложение А

Рекомендуемые темы докладов по теме**«Методы моделирования химико-технологических процессов»**

- 1 Классификация и понятие моделей.
- 2 Физическое моделирование.
- 3 Математическое моделирование.
- 4 Классификация математических моделей.
- 5 Принципы математического моделирования процессов химической технологии.
- 6 Классификация параметров математической модели.
- 7 Исследование ХТП методом математического моделирования.
- 8 Определение и схема ХТП.
- 9 Классификация уравнений модели.
- 10 Этапы построения математической модели ХТП.
- 11 Математические методы в практике работы химико-аналитических лабораторий.
- 12 Математическое моделирование как современный метод анализа и синтеза химико-технологических процессов (ХТП).
- 13 Методологические основы построения математических моделей процессов химической технологии.
- 14 Метод физического и математического моделирования.
- 15 Сущность и цели математического моделирования объектов химической технологии.
- 16 Два подхода к составлению математических моделей процесс: детерминированный и стохастический, сферы использования.
- 17 Математическое описание детерминированных ХТП.
- 18 Моделирование кинетики гомогенных химических реакций.
- 19 Кинетические модели гомогенных химических реакций.
- 20 Моделирование кинетики гетерогенных каталитических реакций.

Приложение Б

**Рекомендуемые темы рефератов по теме
«Гидродинамические процессы.
Математическое моделирование гидродинамической
структуры однофазных потоков»**

- 1 Элементы прикладной гидравлики
- 2 Гидростатика и гидродинамика
- 3 Гидродинамическое подобие
- 4 Частные случаи движения жидкости
- 5 Движение жидкости по трубопроводам
- 6 Гидродинамика кипящего (псевдоожиженного) слоя
- 7 Перемещение. Насосы для перемещения жидкостей
- 8 Компрессоры
- 9 Механическое перемешивание жидкостей
- 10 Разделение гетерогенных систем. Основы расчета
- 11 Скорость осаждения. Фильтрация
- 12 Типовые математические модели структуры потоков в аппаратах, как основа построения математических моделей ХТП.
- 13 Модель идеального перемешивания.
- 14 Модель идеального вытеснения.
- 15 Модель с неполным продольным смешением – диффузионная однопараметрическая модель.
- 16 Модель с неполным продольным и поперечным смешением – диффузионная двухпараметрическая модель. Ячеечная модель.
- 17 Реакторные процессы в химической промышленности.
- 18 Структурный анализ процессов, протекающих в реакторе.
- 19 Подход к построению математической модели химического реактора.
- 20 Формирование модели гомогенного реактора идеального перемешивания.

Приложение Г

**Перечень вопросов к зачету по дисциплине
«Математические методы в химии»**

Теория подобия как теоретическая база физического моделирования. Движение вязкой жидкости. Теория подобия. Дифференциальные уравнения теплообмена для модели. Гидродинамическое подобие. Тепловое подобие. Диффузионное подобие. Диффузия в турбулентном потоке. Вывод уравнения подобия. Теплодиффузионные процессы сушки твердых тел газом, проходящим через слой материала. Вывод уравнения проточной экстракции. Определение постоянных величин в критериальных уравнениях. Метод анализа размерностей. Коэффициент теплоотдачи при конденсации паров. Принудительная конвекция при высокой скорости потока. Свободная конвекция. Расход энергии для вентилятора. Расход энергии на перемешивание жидкостей в реакционных аппаратах. Определение искомых параметров для модели при исследовании производственных процессов.

Методы моделирования химико-технологических процессов. Понятие модели. Классификация моделей. Физическое моделирование. Математическое моделирование. Классификация математических моделей. Принципы математического моделирования процессов химической технологии. Классификация параметров математической модели. Исследование ХТП методом математического моделирования. Определение и схема ХТП. Классификация уравнений модели. Этапы построения математической модели ХТП.

Математическое моделирование гидродинамической структуры однофазных потоков. Универсальный вид математической модели гидродинамики потока. Время пребывания элементов потока как случайная величина. Экспериментальное изучение распределения времени пребывания элементов потока. Кривые отклика. Получение кривых отклика. Интегральная и дифференциальная функции распределения времени пребывания элементов потока. Типовые модели структуры потоков. Модель идеального смешения. Модель идеального вытеснения. Однопараметрическая и двухпараметрическая диффузионные модели. Ячеечная модель. Комбинированные модели. Зона идеального перемешивания - байпасный поток. Зона идеального перемешивания - застойная зона. Зона идеального перемешивания - зона идеального вытеснения (параллельное и последовательное расположение). Алгоритм идентификации математического описания структуры потоков.

Модели неидеальных потоков. Ячеечная модель. Однопараметрическая диффузионная модель. Ячеечно-циркуляционная модель. Двухпараметрическая диффузионная модель. Комбинированные модели. Элементарный объем.