

## АННОТАЦИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

### «Информатика в приложении к отрасли»

Дисциплина «Информатика в приложении к отрасли» является частью программы бакалавриата «Химическая технология (общий профиль, СУОС)» по направлению «18.03.01 Химическая технология».

### Цели и задачи дисциплины

Целью учебной дисциплины является ознакомление студентов с основными приемами использования ЭВМ для решения задач возникающих в производственной деятельности на примере задач физической химии, изучение методов и формирование навыков решения подобных задач с использованием ЭВМ, а также закрепление навыков и умений, полученных студентами при изучении дисциплины "Информатика"..

### Изучаемые объекты дисциплины

Задачи дисциплины: • изучение круга задач физической химии, которые могут быть решены с привлечением ЭВМ; • формирование умения выбора подходящих вычислительных математических методов для проведения физико-химических расчетов; • формирование умения определения алгоритмов реализации математических методов для физико-химических расчетов; • формирование навыков решения основных физико-химических задач с применением ЭВМ..

### Объем и виды учебной работы

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах
		Номер семестра
		5
1. Проведение учебных занятий (включая проведение текущего контроля успеваемости) в форме:	45	45
1.1. Контактная аудиторная работа, из них:		
- лекции (Л)	16	16
- лабораторные работы (ЛР)		
- практические занятия, семинары и (или) другие виды занятий семинарского типа (ПЗ)	27	27
- контроль самостоятельной работы (КСР)	2	2
- контрольная работа		
1.2. Самостоятельная работа студентов (СРС)	63	63
2. Промежуточная аттестация		
Экзамен		
Дифференцированный зачет		
Зачет	9	9
Курсовой проект (КП)		
Курсовая работа (КР)		
Общая трудоемкость дисциплины	108	108

### Краткое содержание дисциплины

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
5-й семестр				
Использование ЭВМ в ходе расчетов кинетики химических процессов.	6	0	11	28
<p>Тема 8. Кинетические уравнения реакций. Порядок реакции. Зависимость скорости реакции от температуры. Определение энергии активации. Подходы к решению этих задач с использованием прикладных программных продуктов.</p> <p>Тема 9. Прямая и обратная задача химической кинетики. Численное интегрирование систем дифференциальных уравнений химической кинетики. Формальная кинетика. Подходы к расчету порядка реакции по экспериментальным данным в прикладных программных продуктах. Влияние начальных условий на решение системы уравнений химической кинетики.</p> <p>Тема 10. Расчет размера или материального баланса реакторов идеального смешения, в том числе с учетом теплового баланса. Подходы к решению с использованием прикладных программных продуктов.</p> <p>Тема 11. Расчет размера или материального баланса реакторов идеального вытеснения, в том числе с учетом теплового баланса. Подходы к решению этих задач с использованием прикладных программных продуктов.</p>				

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
Использование ЭВМ в ходе термодинамических расчетов.	8	0	12	28
<p>Тема 1. Круг задач физики, химии и физической химии, которые могут быть решены с привлечением ЭВМ. Программные продукты. Характеристика задач и выбор программных продуктов для их решения.</p> <p>Тема 2. Тепловой эффект реакции, изменение энтропии и теплоемкость в изобарных и изохорных условиях, их зависимости от температуры. Подходы к расчету данных параметров с использованием прикладных программных продуктов.</p> <p>Тема 3. Подходы к решению задач на термодинамический анализ реакций с использованием прикладных программных продуктов.</p> <p>Тема 4. Равновесие в химических реакциях. Способы выражений констант равновесия и взаимосвязь между ними. Стандартная константа равновесия. Расчет константы равновесия реакции при различных температурах в прикладных программных продуктах.</p> <p>Тема 5. Расчеты равновесного состава. Численные решения. Применение численных методов условной оптимизации для расчета равновесного состава. Существование и единственность решения. Термодинамические и математические особенности в задачах расчета равновесия в прикладных программных продуктах. Подходы к решению задач по определению равновесных составов для простых, параллельных и последовательных обратимых реакций</p>				
Использование ЭВМ для математической обработки данных	2	0	4	7
<p>Тема 6. Аппроксимация уравнений для различных физических зависимостей. Метод наименьших квадратов. Подходы к выполнению аппроксимации в прикладных программных продуктах.</p> <p>Тема 7. Способы выражения состава гомогенных и гетерогенных систем. Соотношения между различными способами выражения состава. Использование состава для расчета средней плотности, теплоемкости</p>				

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
и молекулярной массы смеси. Подходы к расчету данных параметров с использованием прикладных программных продуктов.				
ИТОГО по 5-му семестру	16	0	27	63
ИТОГО по дисциплине	16	0	27	63