

## ВВЕДЕНИЕ

Научно-методической основой изучения курса "Общая химическая технология" является математическое моделирование химико-технологических процессов, и потому лабораторные работы представлены как вычислительный эксперимент с использованием вычислительной техники (компьютерный эксперимент) и предназначены для развития навыка исследовать и анализировать химико-технологический процесс. Для этих целей используются программы "LabOXT-reactor", "LabOXT-SO2" и "LabOXT-trener". Они представляют собой проблемно-ориентированные программы для автоматизации сложных вычислений, причем интеллектуальная нагрузка по постановке задачи и анализа результатов исследования процессов перенесена на пользователя - обучающегося.

Подготовка к вычислительному эксперименту представляет собой этап обучения и включает (для первых двух программ):

- сбор физико-химических данных (работа со справочной литературой);
- определение последовательности расчетов (формулировка задачи и обоснование модели процесса);
- расчет коэффициентов уравнений, решаемых в программах (определение параметров процесса, развитие навыков работы с величинами разной размерности);
- интерпретация результатов (расчет показателей процесса на основе результатов вычислений).

Каждая программа содержит краткий учебный материал, методические указания и инструкции пользователя ("Помощь" или Help).

Работа с программным комплексом ведется в диалоговом режиме, для чего имеется дружелюбный интерфейс, включающий ряд меню, пояснения по порядку работы с программой и необходимые комментарии.

Результаты расчетов выводятся на экран монитора как в табличном, так и графическом виде, чтобы можно было сопоставлять промежуточные результаты расчетов для выбора окончательного варианта. Оформление результатов расчета предоставляется обучающемуся, чтобы закреплять навыки создания технической документации.

Предусмотрена защита от ошибочных и несанкционированных действий, причем комментарии об ошибках не всегда содержат все пояснения об ошибках. В этих случаях обучающийся сам должен определить причину отказа вычислений (неправильная размерность введенных величин, несогласованность задаваемых параметров, невозможность протекания процесса при заданных условиях и т. д.).

### Порядок выполнения работы

1. Получение задания.
2. Подготовка к выполнению работы:
  - ознакомиться с теорией процесса (схема процесса, реакции, исходные уравнения и математические модели, описывающие процесс в соответствии с заданием), используя материал пособия и учебник;
  - для закрепления теоретического материала ответить на контрольные вопросы;
  - ознакомиться с техникой выполнения расчетного эксперимента (выбор компьютерной программы, ее описание и возможности, преобразование исходной модели к расчетной, используемой в выбранной программе);

- определить данные, которые необходимо подготовить для выполнения расчетного эксперимента (составить перечень режимов работы программы и параметров, приведенных в описании программы);
  - провести расчет параметров расчетных уравнений для выбранной программы, используя данные задания.
3. Показать результаты подготовки преподавателю для допуска к выполнению расчетного эксперимента.
  4. Провести необходимые расчеты на компьютере.
  5. Обработать полученные данные и провести дополнительные расчеты в соответствии с заданием.
  6. Оформить отчет по выполненной работе.

### **Форма отчета (порядок изложения)**

Отчет представляет собой технический документ по выполненной работе, т.е. должен быть изложен логически ясно и содержать необходимые пояснения всех действий, обозначения и ссылки на источники дополнительной информации. Примерные разделы отчета следующие:

1. Постановка задачи – задание лабораторной работы.
2. Формулировка задания – уравнение реакции, моделей процессов и реакторов и другие уравнения, необходимые для выполнения задания.
3. Программы, используемые для расчета.
4. Расчетные уравнения – преобразование исходных математических моделей в расчетные и составление данных (параметров), вводимых по запросу программы.
5. Расчет исходных данных в соответствии с заданием и расчет параметров расчетных уравнений для выбранной программы.
6. Результаты расчета – цифровые результаты расчета (их можно совместить с таблицей исходных данных, если это удобно для обзора и анализа полученных результатов), результаты расчета в графическом виде.
7. Дополнительные расчеты в соответствии с заданием.
8. Выводы – итоговые результаты расчета и их обсуждение в соответствии с заданием.

### **Общие рекомендации по выполнению задания**

Выполнение задания требует подготовки исходных данных для расчета, что связано со следующим:

- 1) Исходная модель должна быть преобразована в расчетную модель, используемую в программе. Поэтому параметры и коэффициенты этих моделей могут не совпадать. Требуется параметры расчетной модели, которые надо ввести по запросу программы, рассчитать из условий задания.
- 2) В задании указываются размерности значений величин параметров и условий процесса. Программа указывает, в какой размерности надо вводить параметры и условия процесса. Необходимо привести задаваемые параметры в нужную размерность.

Надо осознанно представить себе – как получить или рассчитать данные, которые будет запрашивать программа, и обратить особое внимание на размерности используемых величин.

Целесообразно ряд результатов расчета представлять на одном графике, чтобы можно было провести сопоставление и анализ результатов компьютерного моделирования процесса.