

Министерство образования Республики Беларусь  
Учреждение образования  
"Брестский государственный технический университет"  
Кафедра инженерной экологии и химии

**Обучающие имитационно-моделирующие  
компьютерные программные средства в изучении  
экологических и химических дисциплин**

# **МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ**

к лабораторным и практическим работам по курсам  
«Химия», «Общая, неорганическая и физическая химия»,  
«Органическая химия», «Основы экологии»,  
«Отраслевая экология»

для студентов специальностей:

36 01 01 Технология машиностроения,  
36 01 03 Технология и оборудование машиностроительного производства,  
37 01 06 Техническая эксплуатация автомобилей,  
53 01 01 Автоматизация технологических процессов и производств,  
70 01 01 Производство строительных изделий и конструкций,  
70 02 01 Промышленное и гражданское строительство,  
70 03 01 Автомобильные дороги,  
70 04 03 Водоотведение, водоснабжение и охрана водных ресурсов,  
74 05 01 Мелиорация и водное хозяйство



Брест  
2002

## УДК

Методические указания содержат описание лабораторных работ с использованием персональной вычислительной техники, предусмотренных программой курсов "Химия", "Общая, неорганическая и физическая химия", "Органическая химия", "Основы экологии", "Отраслевая экология" для студентов различных специальностей.

В методические указания включены сведения о принципах реализации обучающих имитационно-моделирующих и тестирующих компьютерных программ, применяемых в учебном процессе на кафедре инженерной экологии и химии Брестского государственного технического университета, а также даны подробные инструкции по правилам их использования. Отдельный раздел посвящен технике безопасности при работе с персональными компьютерами.

Составители: Басов С.В., *к.т.н., доцент*,  
Яловая Н.П., *старший преподаватель*,  
Головач А.П., *старший преподаватель*,  
Халецкий В.А., *старший преподаватель*  
*Кафедра инженерной экологии и химии*  
*Брестского государственного технического университета*

Гнатюк С.П., *к.х.н., доцент*  
*Кафедра общей химической технологии и промышленной экологии*  
*Санкт-Петербургский государственный университет кино и*  
*телевидения*

Рецензент: Новиков Д.В., *к.х.н., научный сотрудник*  
*Лаборатория морфологии полимеров*  
*Институт высокомолекулярных соединений (г. Санкт-Петербург)*  
*Российская академия наук*

© Басов С.В., Яловая Н.П., Головач А.П., Халецкий В.А., Гнатюк С.П., 2002

© Учреждение образования: "Брестский государственный технический университет", 2002

## ВВЕДЕНИЕ

Реалии сегодняшнего дня вызванные «электронной революцией», произошедшей в последние десятилетия XX века, привели к повсеместному применению средств и методов вычислительной техники, оснащению современного производства оборудованием и системами с элементами искусственного интеллекта.

Современного образованного молодого человека сегодня проще удивить стеклянной химической посудой или простым механическим устройством, чем микропроцессорным комплексом или электронным прибором. Все это заставляет изменять методические подходы к изучению как базовых естественнонаучных дисциплин (физики, химии, экологии и т.д.), так и специальных курсов, с учетом достижений высоких технологий и связанным с этим процессом изменения общественного сознания.

В связи с этим вопрос совершенствования форм и методов преподавания цикла общенаучных, общепрофессиональных, экологических и специальных дисциплин в современной высшей школе при широком внедрении в учебный процесс средств вычислительной техники является одним из ключевых при реформировании системы образования.

Мнение о высокой эффективности различных компьютерных систем (в том числе, имитационно-моделирующих и тестирующих) и необходимости их широкого применения в повседневной педагогической практике в высших учебных заведениях на сегодняшний день является общепринятым; публикуется большое количество работ по тем или иным формам и методам имитационного моделирования, тестирования, рейтинговой оценки и т.п. [1-5].

Известно, что лабораторные и практические работы с применением средств вычислительной техники являются важнейшим этапом учебного процесса, совершенствующим теоретическую и практическую подготовку будущего специалиста.

На сегодняшний день принято несколько подходов к классификации обучающих программных средств (ОПС), из которых наиболее распространенным является деление их по функциональному признаку. Соответственно ОПС делятся на программы тренажеры (репетиторы), предназначенные для отработки и закрепления знаний и умений; программы, моделирующие процессы и явления, которые по ряду причин (длительности, или, наоборот, мгновенности его протекания во времени, опасности и т.п.) не могут быть осуществлены в условиях лабораторного эксперимента; демонстрационные программы, иллюстрирующие объекты или явления, скрытые от непосредственного наблюдения учащегося; информационно-справочные программы; и наконец, контролирующие (тестирующие) ОПС, с помощью которых можно осуществлять диагностику и контроль знаний и умений.

Использование в учебном процессе современной вычислительной техники и программного обеспечения подобного типа позволяет сделать наглядными самые сложные абстракции, содействуя формированию у студентов ряда важнейших качеств личности, в частности наблюдательности. В то же время создаются большие возможности для развития определенных компонентов памяти. Наблюдая и управляя моделями, масштабируя, комбинируя и рекомбинируя их компоненты, студенты включаются в процесс воображения, а последнее, как известно, является существенным компонентом творческого мышления [9].

Впервые в рамках химии вычислительная техника была применена в 1953 году в Англии при анализе кристаллов с помощью рентгеновских лучей [10]. С этого времени эффективность использования компьютеров как для решения задач обработки результатов химических исследований, так и для моделирования многих практически труднореализуемых или дорогостоящих экспериментов не вызывает сомнений. Так, например, на самом мощном в мире (на сегодняшний день) суперкомпьютере ASCI White американские ученые из Национальной лаборатории им. Лоуренса смоделировали ядерный взрыв, что потребовало 39 суток вычислений.

Все активнее применяются методы компьютерного моделирования и в экологических науках, причем не только в качестве удобного и современного метода исследований, но и в виде конкретных практических разработок. Одним из наиболее оптимальных способов защиты окружающей среды от негативных последствий техногенного влияния является использование автоматизированных систем мониторинга состояния окружающей среды, математическое моделирование ситуации на основе данных мониторинга и оперативное реагирование на ситуацию. В качестве подобного примера можно привести одно из направлений работы Исследовательского центра в Карлсруэ (Германия) - моделирование загрязнения атмосферного воздуха вблизи автомагистралей. Разработанная специалистами этого центра система мониторинга позволяет ежедневно регистрировать концентрации загрязняющих веществ в атмосферном воздухе, направление и скорость ветра, температурный режим, интенсивность солнечной радиации, учитывать особенности местности, влияние городской застройки и т.п. На базе этой информации создается математическая модель возникшей ситуации и прогноз ее развития. Все это позволяет регулировать транспортные потоки с минимальным ущербом для окружающей среды [8].

Проблема замены в базовом химическом образовании традиционного эксперимента компьютерными имитациями достаточно широко обсуждалась в специальной литературе. В ряде работ, например [11], предлагается полностью отказаться от проведения лабораторных занятий для студентов, не специализирующихся в области химии, заменив их компьютерным моделированием или просмотром учебных телевизионных фильмов по соответствующей тематике с последующей дискуссией. В качестве преимущества данного метода называют значительное удешевление учебного процесса. Однако такой подход, когда активная деятельность студентов заменяется пассивной, вероятнее всего приведет к значительному снижению их интереса к предмету химии. Более рациональным является введение компьютерного моделирования в курс лабораторного практикума лишь для демонстрации отдельных явлений, требующих особо дорогостоящего оборудования, реактивов или иных ресурсов.

Использование компьютерных технологий для контроля усвоения знаний студентов по химии в настоящее время наиболее обеспечено с методической точки зрения. Имеется достаточно много программ-тренажеров, позволяющих проверить практические знания студентов, интенсивно развивается система тестового контроля знаний. Компьютерные системы могут использоваться для проведения всех видов контроля: предварительного (например, при допуске к выполнению работ в лабораторном практикуме), текущего, рубежного, итогового. При этом сам процесс контроля в значительной степени индивидуализируется. Необходимо отметить, что наиболее важным является разработка подхода, позволяющего перейти от контролирующим к контролирующе-обучающим тестам.

Следует добавить, что методика использования компьютеров в учебном процессе должна быть гибкой с точки зрения выбора сценария обучения в зависимости от учебной дисциплины, сложности изучаемого материала и имеющихся вычислительных ресурсов. При этом могут разрабатываться сценарии обучающих систем разного уровня, включая программы, которые применяются даже в отсутствие формального курса.

Таким образом, эффективное применение современных информационных технологий обучения, в том числе, имитационно-моделирующих и тестирующих программных средств, а также развитие компьютерных сетей с использованием ресурсов международного информационного пространства (*Internet* и др.), позволяет повысить качество преподавания и в конечном итоге обеспечить более высокий уровень знаний учащихся.

Настоящие методические указания составлены в соответствии с программой курсов «Химия», «Органическая химия», «Общая, неорганическая и физическая химия», «Основы экологии», «Отраслевая экология» для специальностей 36 01 01 Технология машиностроения; 36 01 03 Технология и оборудование машиностроительного производства; 37 01 06 Техническая эксплуатация автомобилей; 53 01 01 Автоматизация технологических процессов и производств; 70 01 01 Производство строительных изделий и конструкций;

70 02 01 Промышленное и гражданское строительство; 70 03 01 Автомобильные дороги; 70 04 03 Водоотведение, водоснабжение и охрана водных ресурсов; 74 05 01 Мелиорация и водное хозяйство.

В методические указания включены сведения о принципах реализации компьютерных имитационно-моделирующих и тестирующих программ, применяемых в учебном процессе на кафедре инженерной экологии и химии Брестского государственного технического университета, а также даны подробные инструкции по правилам их использования.

Выполнению каждой лабораторной работы должно предшествовать самостоятельное повторение студентом соответствующего раздела теоретического курса, ознакомление с методикой предстоящей работы и правилами оценки ее результатов.

Методические указания состоят из четырех частей.

Первая часть посвящена технике безопасности при работе с персональными компьютерами.

Вторая часть включает описание имитационно-моделирующих программ, применяемых при изучении экологических дисциплин.

В третьей части рассмотрена лабораторная работа, посвященная компьютерному моделированию простых химических реакций в реакторе идеального перемешивания периодического действия.

В заключительной, четвертой, части методических указаний кратко описана обучающе-тестирующая система «Коллоквиум» и приведен список цитируемой и рекомендуемой литературы для самостоятельной подготовки.

# **I. ПРАВИЛА БЕЗОПАСНОСТИ ПРИ РАБОТЕ НА ПЕРСОНАЛЬНЫХ КОМПЬЮТЕРАХ**

1. При работе на персональных компьютерах (ПК) следует придерживаться следующих основных правил:

1.1. Проверка напряжения сети и исправности оборудования. Перед первым включением ПК следует проверить, соответствует ли напряжение сети тому, на которое рассчитан ПК (многие ПК могут работать при нескольких значениях входного напряжения, например 220 и 110 В). В случае необходимости установить переключатель напряжения в правильное положение, соответствующее напряжению сети. В обязательном порядке необходимо проверить наличие заземления всех элементов, входящих в состав ПК (системный блок, монитор, печатающие устройства и т.п.), убедиться в исправности разъемов и в отсутствии открытых или поврежденных токоведущих частей оборудования.

1.2. Стабилизация напряжения. Во многих населенных пунктах напряжение электрической сети может сильно колебаться. Для ПК такие изменения напряжения являются нежелательными (особенно вредны резкие понижения напряжения). По этой причине подключать ПК необходимо через сетевые фильтры, стабилизаторы напряжения (автотрансформаторы) или использовать специальные устройства непрерывного электропитания (UPS), которые не только обеспечивают постоянное напряжение, но и дают возможность работы ПК при полном отключении электропитания в течение от 5 минут до нескольких часов (в зависимости от мощности устройства).

1.3. Системный блок и монитор ПК необходимо устанавливать в таком месте, где они не подвергались бы толчкам и вибрациям. Недопустимо ставить на системный блок печатающее устройство (принтер), особенно матричного типа. Печатающее устройство устанавливают на звукопоглощающую поверхность автономно от рабочего места оператора.

## **1.4. Категорически запрещается:**

- самостоятельно вскрывать включенный в сеть ПК и прикасаться к находящимся в нем деталям;
- загораживать вентиляционные отверстия монитора, системного блока и другого оборудования;
- устанавливать ПК вблизи систем отопления и других источников тепла;
- подключение и коммутация кабелей, соединяющих системный блок ПК с другими устройствами при включенном в сеть оборудовании.

1.5. Необходимо учитывать влияние опасных и вредных факторов, к которым относятся:

- электромагнитное, ультрафиолетовое, инфракрасное и рентгеновское излучения;
- статическое электричество;
- блики и мерцания изображения и связанная с этим нагрузка на органы зрения, возникающая как при длительной работе на ПК, так и при неправильной организации рабочего места.
- гиподинамия, умственные, эмоциональные перегрузки, монотонность труда и т.п.;

Для уменьшения воздействия этих факторов необходимо:

- а) ограничивать максимальное время работы на ПК 3-4 часами в день и соблюдать время регламентированных перерывов (в общем случае - 5-10 минут перерыва после каждого часа работы или 15-20 минут после каждых двух часов работы);
- б) правильно установить монитор - экран необходимо слегка наклонить таким образом, чтобы его нижний край был ближе к оператору, смотреть на экран желательно под прямым углом (а не сбоку) и немного сверху вниз при этом расстояние от экрана монитора до глаз оператора должно составлять не менее 50-70 см;
- в) отрегулировать яркость и контрастность изображения, а также добиться

максимальной четкости при помощи регуляторов фокусировки. Для устранения бликов, мерцаний и т.п., а также для поглощения возникающих при работе монитора излучений необходимо использовать специальные защитные экраны-фильтры. Фильтры из металлической или нейлоновой сетки использовать нежелательно, так как сетка приводит к искажениям (интерференции) изображения. Фильтры из обычного тонированного стекла не устраняют блики, хотя и несколько повышают контрастность изображения. Наилучшее качество изображения обеспечивают стеклянные поляризационные фильтры - они устраняют практически все блики и вредные излучения, делают изображение более четким и контрастным. Норма освещенности экрана монитора составляет 100-200 лк; поверхности стола в зоне размещения рабочего документа 300-500 лк. Яркость экрана должна быть не менее 35 кд/м<sup>2</sup>;

г) соблюдать оптимальный микроклимат в помещении: минимальные размеры рабочего места одного пользователя - площадь 6 м<sup>2</sup>, объем 20 м<sup>3</sup>, температура воздуха 21-25°C, относительная влажность 40-60%, скорость движения воздуха не более 0.1 м/с, разность температур на уровне пола и головы сидящего оператора не более 3°C;

д) проводить ежедневную влажную уборку помещения;

ж) один раз в несколько месяцев открывать системный блок ПК и удалять пылесосом накопившуюся внутри пыль.

Профессиональные пользователи ПК должны проходить периодические плановые медосмотры. К работе с компьютерной техникой допускаются только лица, не имеющие медицинских противопоказаний.

2. При поражении электрическим током следует немедленно выключить ток рубильником или перерубить провод. Затем следует отделить пострадавшего от электрического прибора или провода, что нужно делать в резиновых перчатках или при помощи сухой веревки (сухой шерстяной ткани). Брать пострадавшего необходимо не за тело, а за одежду.

Если пострадавший потерял сознание и дышит редко, судорожно, со всхлипыванием, а дыхание постепенно ухудшается или прекращается, то необходимо немедленно вызвать врача и до его прибытия делать искусственное дыхание. Для этого пострадавшего освобождают от стесняющей дыхание одежды, удаляют изо рта посторонние предметы, если рот стиснут, раскрывают его, выдвинув нижнюю челюсть или осторожно разжав зубы дощечкой, металлическим предметом и т.п.

Когда пострадавший придет в себя необходимо дать ему немного отдохнуть, а затем сопроводить в медицинское учреждение для обследования или госпитализации.

## II. ИМИТАЦИОННО-МОДЕЛИРУЮЩИЕ ОБУЧАЮЩИЕ ПРОГРАММЫ «МАЛАЯ РЕКА» И «ОЗЕРО»

### 2.1. Лабораторная работа с использованием имитационно-моделирующей программы "Малая река"

Лабораторная работа проводится для определения мероприятий по охране водных ресурсов. При рациональном ведении производственно-хозяйственной деятельности на ограниченной территории необходимо учитывать взаимодействие природных и антропогенных экологических факторов.

Цель работы - выбор оптимальных параметров функционирования природно-хозяйственной системы (ПХС) для достижения максимальной прибыли от производственно-хозяйственной деятельности при нанесении минимального ущерба (или при отсутствии такового) для населения и окружающей среды. Лабораторная работа осуществляется в виде деловой игры небольшими группами (командами) студентов (по 2-4 человека).

Выполнение предлагаемой лабораторной работы закрепляет у студентов теоретический материал дисциплины "Отраслевая экология" и развивает навыки планирования и руководства в осуществлении производственной деятельности. В работу может быть внесен эффект состязательности.

Следует отметить, что объекты производственно-хозяйственной деятельности, представленные в игре «Малая река», рассматриваются чисто условно. На их месте могут быть предприятия любой отрасли народного хозяйства: химической, машиностроительной, транспортной, энергетической и т.п.

При проведении работы важен подход к ведению производственно-хозяйственной деятельности с учетом целого ряда факторов, включая экологическую защиту окружающей среды.

#### 2.1.1. Условия и правила моделирования

##### Состав ПХС

В программе имитационной компьютерной игры "Малая река" моделируются процессы ПХС, состоящей из следующих элементов:

- ◆ участка реки;
- ◆ промышленного предприятия;
- ◆ животноводческого комплекса (фермы);
- ◆ сельскохозяйственных угодий;
- ◆ жилого поселка;
- ◆ передвижной станции контроля качества воды (ПСК).

На экране монитора представлена схема размещения элементов ПХС.

##### Характеристика элементов ПХС

**Участок реки** характеризуется определенной глубиной, шириной, скоростью течения. Во время паводка скорость течения и расход воды в реке могут повышаться (это наблюдается в режиме работы по месяцам).

**Промышленное предприятие** располагается в районе верхней части реки, проходящей через территорию ПХС. При функционировании оно сбрасывает в реку промышленные сточные воды, содержащие органические вещества. Количество сбрасываемых сточных вод зависит от объема производимой продукции, который изменяется от 0 до 150 единиц в сутки. При производстве одной единицы продукции сбрасывается  $0.1 \text{ м}^3$  сточных вод при биохимическом потреблении кислорода (БПК) 2000

мг/л.

**Животноводческий комплекс** располагается в районе среднего участка реки и предназначается для выращивания свиней (от 0 до 2000 голов) или крупного рогатого скота (от 0 до 1000 голов). При выращивании животных образуется в сутки: от одной свиньи - 4.5 л навозной жижи с БПК 6000 мг/л, от одной коровы - 14 л навозной жижи с БПК 8000 мг/л.

На **сельскохозяйственных угодьях** могут выращиваться различные виды сельскохозяйственных культур: пшеница, рожь, ячмень, кукуруза, картофель и др. Можно использовать повторные и бессменные посеы, чередование культур в севообороте. Например, после картофеля, корнеплодов, кукурузы хорошо размещать яровые зерновые, лен, зернобобовые. Поскольку картофель, кукуруза, корнеплоды - это культуры, требующие высокого плодородия почвы, под них вносятся органические удобрения. Так как питательные вещества органических удобрений используются в первый год только на 50-60%, то их последствие сказывается на урожайности последующих культур.

Ценность зерновых культур как предшественников ниже, чем предыдущих групп культур и зависит от места, которое они занимают в севообороте. Так, после ячменя лучше разместить озимую рожь.

Посредственными предшественниками являются яровые зерновые, посеянные после зерновых. В этом случае после них необходимо произвести посев культур, способных повысить плодородие почв.

К хорошим предшественникам относятся такие, после которых урожайность последующей культуры составляет 100-95% от потенциальной.

К возможным предшественникам относятся такие, после которых урожайность последующей культуры составляет 94-90%. Если же после них урожайность снижается более чем на 10%, размещать культуры после таких предшественников нецелесообразно (см. табл.1).

*Таблица 1. Предшественники сельскохозяйственных культур*

Культуры	Допустимый срок возврата на прежнее поле, лет	Предшественники	
		хорошие	возможные
Озимые зерновые (пшеница, рожь, ячмень)	1-3	Картофель, кукуруза	Ячмень (для ржи)
Картофель	2-3	Озимые зерновые	Кукуруза, яровые зерновые
Кукуруза	0-1	Картофель, озимые зерновые	Кукуруза

Для повышения урожайности могут вноситься удобрения, известкуется почва, и применяются ядохимикаты. Используются следующие предельно допустимые дозы внесения удобрений и ядохимикатов:

- ◆ азотные, калийные, фосфорные удобрения вносятся не более 50 кг/га для каждого вида;
- ◆ органические удобрения - не более 20 т/га;
- ◆ известкование проводится с использованием не более 2 т извести на га;
- ◆ метафос (средство борьбы с вредителями) вносится не более 30 кг/га;
- ◆ цинеб (средство борьбы с болезнями) - не более 3,5 кг/га;
- ◆ атразин (средство борьбы с сорняками) - не более 6,0 кг/га (например, в посевах кукурузы для уничтожения однолетних двудольных сорняков применяется атразин в дозах 3-4 кг/га).

**Жилой поселок** производит забор воды из реки для хозяйственно-питьевого водоснабжения населения. В программе установлены определенные значения предельно

допустимых концентраций (ПДК) для ядохимикатов, БПК, концентрации кислорода в воде. При загрязнении реки необходимо провести очистку воды с затратой дополнительных средств.

*Передвижная станция контроля качества воды (ПСК)* производит определение содержания кислорода и органических веществ, поступающих в результате производственно-хозяйственной деятельности в воду и величину БПК. Место расположения станции выбирают участники игры самостоятельно.

## **Управление ПХС**

### ***Антропогенное воздействие на экосистему***

Из характеристики элементов ПХС очевидны источники вредного воздействия на ее экологическое состояние, которое оценивается в данном случае по степени загрязнения речной воды. Работа промышленного предприятия и фермы может быть причиной сброса в реку органических веществ. При использовании удобрений и ядохимикатов следует учитывать не только загрязнение реки за счет смыва их дождевыми и паводковыми водами, но и возможность накопления в почве веществ, внесенных в избыточных количествах и не усвоенных растениями. Впоследствии они также попадают в реку и загрязняют как воду, так и донные отложения (вторичное загрязнение). При выполнении работы имеется возможность оказывать управляющее воздействие на хозяйственные объекты с тем, чтобы изменять величину вредного влияния, оказываемого ими на окружающую среду.

Игрок имеет возможность:

- ◆ выбрать интенсивность работы предприятия;
- ◆ вид и количество животных на ферме (один раз в начале игры);
- ◆ выбрать сельскохозяйственную культуру и необходимые для достижения урожая удобрения и ядохимикаты;
- ◆ выбрать методы очистки сточных вод с предприятия и фермы;
- ◆ определить место расположения ПСК на реке;
- ◆ применить другие природоохранные мероприятия.

В качестве природоохранных мероприятий можно использовать лесонасаждения, вспашку, искусственную аэрацию. Насаждение лесополос по берегу реки уменьшает дождевой сток, и, следовательно, вынос загрязняющих веществ. При этом влияние лесополосы растет с ее возрастом. По условиям игры возможно создание лесополосы в один, два или три ряда шириной каждый в 10 метров вдоль всей реки.

Применение различных видов вспашки также обеспечивает уменьшение стока с полей дождевой воды (см. приложение 1). При этом применение:

- уплотненной вспашки уменьшает сток на 16%;
- безотвальной вспашки - на 45%;
- отвальной с микролиманамми - на 63%;
- отвальной глубиной в 22-25 см - на 62%;
- отвальной глубиной в 35-37 см - на 77 %.

Безусловно необходимой является очистка сточных вод предприятия и фермы. Механическая очистка позволяет снизить концентрацию загрязняющих веществ примерно на 50%, биологическая очистка - на 80%, биологическая с доочисткой - на 98%. Высокая концентрация кислорода в воде снижает содержание загрязняющих органических веществ за счет их более быстрого разложения путем окисления. Увеличить содержание кислорода возможно путем аэрации (нагнетания воздуха в воду через аэраторы).

### ***Экономические показатели***

Затраты складываются из затрат на реализацию природоохранных мероприятий, обработку сельхозугодий, внесение удобрений и ядохимикатов. Прибыль от ведения производственно-хозяйственной деятельности складывается из прибыли, полученной от реализации произведенной продукции. Экономический ущерб зависит от качества воды в

реке и складывается из затрат на дополнительную очистку воды для нужд поселка, потерь от заболеваний населения, затрат учреждений здравоохранения в связи с болезнями населения, возникающими из-за загрязнения окружающей среды, собственных затрат населения, связанных с поездками на отдых в другие места. Основные данные о затратах на вспашку, внесение удобрений и ядохимикатов, а также очистку сточных вод различными методами можно получить с помощью функциональной клавиши F1. Из остальных статей отметим: затраты на повышение концентрации кислорода на  $1 \text{ мг/м}^3$  при аэрации составляют 0.25 руб.

Прибыль получается при реализации произведенной продукции в следующих размерах:

- ◆ за единицу продукции предприятия - 12 руб.
- ◆ за одну голову свиньи за год - 100 руб.
- ◆ за одну голову крупного рогатого скота - 200 руб.
- ◆ за пшеницу (за один центнер) - 30 руб.
- ◆ за ячмень (за один центнер) - 30 руб.
- ◆ за рожь (за один центнер) - 28 руб.
- ◆ за кукурузу (за один центнер) - 12 руб.
- ◆ за картофель (за один центнер) - 10 руб.

*Задача работы* – получить максимальную прибыль при нанесении минимального ущерба окружающей среде. В программе заложена оценка участникам игры по итогам пяти лет работы. Для получения оценки «отлично» необходимо получить прибыль не менее пяти миллионов рублей и при этом не нанести никакого экологического ущерба реке.

### **2.1.2. Работа с программой**

Работа осуществляется в диалоговом режиме и не требует какой-либо особенной подготовки. В игре реализуется два режима работы программы или моделирования – «*по месяцам*»\* (в течение 12 месяцев) и «*по годам*» (в течение пяти лет). В режиме «по месяцам» тур длится один месяц. В режиме «по годам» игра осуществляется в пять туров, т.е. в пятилетнем рабочем цикле подводятся ежегодно промежуточные результаты работы, а затем дается итоговый результат за весь цикл.

Итоги подводятся в виде экономических показателей по статьям затрат и прибыли и по экономическому ущербу.

В начале каждого года задаются рабочие параметры функционирования ПХС:

- ◆ интенсивность работы предприятия;
- ◆ вид и количество голов скота на ферме (только в первый год);
- ◆ методы очистки сточных вод предприятия и фермы;
- ◆ вид выращиваемой культуры;
- ◆ количество вносимых удобрений и ядохимикатов;
- ◆ вид вспашки;
- ◆ использование лесонасаждений (посадка возможна только в первый год);
- ◆ расположение ПСК;
- ◆ расположение станции аэрации (если она применяется).

После каждого года имеется возможность изменить некоторые параметры

---

\* Т.к. участники моделирования не являются специалистами в области экологии и сельского хозяйства, поэтому для них вряд ли представит интерес и будет полезна обширная информация в режиме «по месяцам» о динамике уровня воды и ее загрязнения каждые три дня. Поэтому при выборе режима можно рекомендовать сразу начинать работу «по годам». Однако для достижения максимально возможных результатов следует воспользоваться режимом игры «по месяцам», когда управляющее воздействие на ПХС может осуществляться с учетом сезонных условий, осадков и т.д.

функционирования ПХС.

### **2.1.3. Рекомендации по ведению моделирования**

◆ Внимательно ознакомьтесь с общей схемой игры, (вызывая клавишу F1) и обратите внимание на связи, которые в ней заданы и которые могут отличаться от существующих в окружающей среде (например, погодные условия в данной игре никак не влияют на урожайность культур, а влияют лишь на величину поверхностного стока).

◆ Ознакомьтесь с расценками на вспашку, очистку, аэрацию, посадку лесополосы, стоимость ядохимикатов, удобрений (см. Приложение 1 или клавиша F3). Для проверки влияния любого из параметров функционирования ПХС или природоохранных мероприятий следует задать только интересующий параметр, а остальные положить равными нулю или, если их нельзя приравнять к нулю, то положить равными какому-либо постоянному числу и оставить без изменения в проверочных циклах. Затем сравнить итоги двух туров. Используя такой подход, можно определить способ очистки сточных вод, оптимальных доз удобрений и ядохимикатов, мощность предприятия, размер поголовья на ферме.

◆ Определите, изменяя параметры доходной части игры, какую прибыль можно получить от единицы продукции за год (клавиша F3).

◆ Определите, какую прибыль можно получить при изменении интенсивности работы предприятия, увеличения количества голов скота или увеличения урожайности сельскохозяйственных культур.

◆ Определите величину ущерба, наносимую реке от производственно-хозяйственной деятельности ПХС (определяется в итоге работы за год).

◆ Измените методы очистки воды и определите величину убытков, связанных с ними.

◆ По полученным данным начните оптимизацию процесса увеличения прибыли производственно-хозяйственной деятельности при одновременном сохранении или уменьшении величины экономического ущерба от Вашей деятельности.

*Помните, что Ваша задача – получение максимальной прибыли при нанесении минимального ущерба окружающей среде.*

### **2.1.4. Оценка результатов**

Оценка выставляется по итогам пятилетнего цикла моделирования. При этом промежуточные экономические результаты после каждого года производственно-хозяйственной деятельности выводятся на экран монитора, а при использовании функциональной клавиши F10 могут наблюдаться за несколько сыгранных до этого момента лет. Наблюдаемые параметры, характеризующие результаты производственно-хозяйственной деятельности (прибыль, затраты, экономический ущерб), позволяют оценить правильность выбранного метода хозяйствования и внести необходимые коррективы на последующий год.

При исследовании связей и закономерностей, заложенных в игре, не следует обращать внимание на итоговую оценку, выдаваемую ЭВМ.

Оценка «отлично» выставляется при получении прибыли в 5 млн. рублей без нанесения ущерба реке. Максимально возможная прибыль превосходит 5.5 млн. рублей.

## **2.2. Лабораторная работа с использованием имитационно-моделирующей программы "Озеро"**

Лабораторная развивает навыки управления природно-хозяйственной системой (ПХС). В программе "Озеро" рассматриваются вопросы охраны небольшого водоема в условиях ограниченного финансирования природоохранных мероприятий.

Цель работы - не получение максимально возможной прибыли, а выведение водоёма из состояния загрязнения и поддержание его в нормальном состоянии с минимальными

финансовыми затратами.

Для успешного управления ПХС необходимо знание закономерностей, влияющих на водный баланс водоема, превращение и деструкцию загрязняющих веществ, насыщение воды кислородом.

### **2.2.1. Описание ПХС**

Моделируемая в программе «Озеро» управляемая ПХС включает в себя:

- ◆ водоем размером 200х300м, условно разбитый на три зоны одинаковых размеров (200х100м): промышленную, среднюю и культурную;
- ◆ *прибрежные предприятия* (завод, фабрика и база используют водные ресурсы для производственных нужд и сбрасывают загрязнённую сточную воду, ботанический сад только забирает воду для полива);
- ◆ *систему контроля качества воды* (две стационарные станции: по одной в промышленной и в средней зонах, одна передвижная станция используется при необходимости в культурной зоне);
- ◆ *службу управления качеством воды* (осуществляет подкачку чистой воды в промышленную зону, сброс воды из культурной зоны, искусственную аэрацию в средней и культурной зонах);
- ◆ *финансирующий орган.*

### **2.2.2. Условия и правила моделирования**

Моделирование охватывает временной отрезок продолжительностью 2 месяца (условно с 1 июня по 30 июля). *Задача студентов* - в течение первого месяца вывести озеро из состояния загрязнения, а в течение следующего месяца поддерживать его в незагрязненном состоянии.

На все природоохранные мероприятия выделяется условно 300 рублей. В том случае, если эта сумма будет досрочно израсходована, ПХС развивается без управления, что приведет к ухудшению качества воды. За каждый день второго месяца, в течение которого состав озерной воды не будет соответствовать нормам, начисляется один штрафной балл.

Управляющее воздействие заключается в возможности изменения следующих параметров:

- ◆ объема поступления чистой воды;
- ◆ объема откачки загрязнённой воды;
- ◆ производительности станций аэрации;
- ◆ продолжительности развития ПХС при заданных параметрах.

Процесс управления осуществляется в игровых промежутках, имеющих продолжительность, задаваемую игроющими.

В программе предусмотрено, что деятельность предприятий может изменяться каждую декаду, итогом чего является изменение количества и степень загрязнения сточной воды, а также объем забора воды ботаническим садом для полива. Объем забираемой предприятиями воды равен объему сбрасываемых сточных вод.

Установлены предельно допустимые концентрации (ПДК) по кислороду (нижний предел), органических («органика») и неорганических («неорганика») веществ (верхний предел).

Гидрометеослужба даёт возможность получать прогноз метеоусловий на каждые 10 дней (температура воздуха и воды, осадки, давление, сила ветра). Нормальным считается уровень воды в озере 9,8-10,2м. В круговороте воды учитывается приход воды за счет дождей и перекачки, а расход - за счёт сброса сточных вод, забора воды ботаническим садом и испарения.

При снижении уровня воды ниже 9.8 м или превышения уровня 10.2 м, по условиям,

автоматически на полную мощность включается соответственно станция перекачки (при отключении сброса сточных вод) или станция сброса (при отключении перекачки) на одни сутки.

Содержание неорганических веществ возрастает за счёт стоков и разложения органических веществ. Около 4% выпадает на дно. Остальная часть очищается только за счет протока воды.

Органика прибавляется при сбросе в озеро сточных вод. Скорость ее разложения пропорциональна концентрации кислорода в воде и температуре воды. Уменьшению концентрации органических веществ способствует также проточность водоёма. Кислород расходуется в основном на разложение органики, а пополняется при искусственной или естественной аэрации, поступления свежей воды за счёт притока и осадков. Естественная аэрация тем эффективнее, чем выше скорость ветра и больше объём осадков. Следует также учитывать, что содержание кислорода в воде зависит от температуры воды и величины атмосферного давления. Концентрация кислорода в воде ограничена насыщением при данных условиях, так что искусственная аэрация не может дать концентрацию выше этого предела.

Перекачка и сброс воды создают в озере течение от промышленной в культурную зону через среднюю зону. В промышленной зоне концентрацию кислорода можно повышать за счет перекачки свежей воды, а в средней к культурной зоне это следует делать с помощью аэрации.

Расценки за работы по перекачке и откачке воды установлены 50 коп. за 1000 м<sup>3</sup>. Работа станций аэрации оценивается в 25 коп. в сутки за повышение кислорода на 1 мг/л.

### **2.2.3. Работа с программой**

Моделирование осуществляется в диалоговом режиме и не требует специальной подготовки студентов.

Меню программы позволяет детально ознакомиться с экологической системой, закономерностями ее циркулирования и осуществлять управление.

В режиме "Помощь" можно получить информацию о программе, условиях и правилах игры. К нему следует обращаться до начала игры.

Режим "Управление" предназначен для задания управляющих параметров:

- ◆ мощность подкачки воды на каждые сутки очередного цикла (в пределах 0-5000);
- ◆ то же для откачки воды (в пределах 0-5000);
- ◆ интенсивность I станции аэрации (в пределах 0-10 мг/л);
- ◆ интенсивность II станции аэрации (в пределах 0-10 мг/л);
- ◆ продолжительность очередного игрового промежутка (3-10 суток).

Интенсивность аэрации означает величину (мг/л), на которую можно поднять концентрацию кислорода без учёта других факторов поступления и расходования воздуха.

Клавиша PgUp позволяет увеличивать шаг изменения параметра в 10 раз за одно нажатие. Клавиша PgDn уменьшает значение параметра в 10 раз. Изменение параметров осуществляется с помощью клавиш \ (увеличение) и (уменьшение).

Режим "Состояние" даёт возможность оценивать сложившуюся в экосистеме ситуацию по выводимой на экран информации о содержании кислорода, неорганики и органики во всех трех зонах, уровне и температуре воды, оставшейся в распоряжении играющих денежной суммы. Информация о начале игры даётся на 01.06, а затем на первый день следующего цикла.

Режим "Прогноз" позволяет получить прогноз на 10 дней о деятельности предприятий (объём используемой воды, содержание загрязнений и кислорода в стоках), а также метеосводку.

Режим "Работа" предназначен для запуска программы. Вход в этот режим возможен только непосредственно из режима "Управление". При этом можно не менять значение

управляющих параметров, они сохраняются на новый игровой промежуток, но вход в режим "Управление" обязателен.

В режиме "Работа" экономическая ситуация развивается в течение заданного игрового промежутка (игрового цикла), вмешаться в этот процесс нет возможности. Изменение в содержании кислорода и загрязняющих веществ демонстрируется на экране дисплея.

По завершении очередного игрового промежутка (цикла) вновь оценивается состояние системы, получается прогноз (при начале работы в начале новой декады), и программа запускается в работу на новый цикл.

#### **2.2.4. Рекомендации по ведению моделирования**

◆ Командам студентов необходимо вести записи по ходу моделирования, которые затем помогут воспроизвести найденный оптимальный режим функционирования экосистемы.

◆ Перед началом работы следует тщательно проанализировать состояние экосистемы, обсудить и наметить тактику моделирования: что надо изменить, какими методами и в какой мере эти возможности следует использовать.

◆ В первый месяц следует устанавливать промежутки в 3-4 дня, лучше таким образом, чтобы студенты могли в первый день каждой декады вносить изменения в управляющие факторы с учетом изменения метеоусловий и работы предприятий. В противном случае можно не учесть изменения режимов работы предприятий в начале очередной декады и не установить управляющие параметры на соответствующем уровне.

◆ При выборе объема притока и сброса воды следует обязательно учитывать высоту уровня озера, а также прогноз осадков, прогноз работы предприятий и степень загрязнения сточных вод, потребности ботанического сада.

◆ Уровень мощности станций искусственной аэрации следует устанавливать с учетом текущего состояния воды, объема сточных вод и содержания органики в них.

◆ Все природоохранные мероприятия проводить с учётом остающейся в распоряжении играющих денежной суммы.

#### **2.2.5. Оценка**

По условиям моделирования, оценку "отлично" получают студенты, не набравшие штрафных баллов, "хорошо" - набравшие не более 10 баллов, 11-15 штрафных баллов оцениваются оценкой "удовлетворительно". Набравшие 16 баллов и больше получают оценку "неудовлетворительно".

### **III. КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОСТЫХ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В РЕАКТОРЕ ИДЕАЛЬНОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ ПЕРИОДИЧЕСКОГО ДЕЙСТВИЯ**

Целью данной лабораторной работы является ознакомление с компьютерной реализацией методов построения детерминированных математических моделей простых химических реакций в реакторе идеального перемешивания периодического действия и формирование представления о химии как прикладной науке, тесно связанной с производством и высокими технологиями.

В работе не ставится задача детального изучения принципов современной химической технологии, ее процессов и аппаратов, систем управления и, тем более, методов математического моделирования т.к. это является предметом изучения отдельных специальных дисциплин.

#### **3.1. Математическое моделирование химических процессов**

Основой любого современного производственного процесса является технологический процесс. Под технологией в широком значении этого слова понимают научное описание методов и средств производства в какой-то отрасли промышленности. Например, методы и средства обработки металлов составляют предмет технологии металлов, методы и средства изготовления машин и аппаратов - предмет технологии машиностроения. Химико-технологический процесс представляет собой совокупность операций, позволяющих получить целевой продукт из исходного сырья.

*Химическая технология - наука о наиболее экономичных и экологически обоснованных методах химической переработки природных материалов в предметы потребления и средства производства.*

Особенностью современных процессов химической технологии, основанных на сложных по своей природе химических и физико-химических явлениях и протекающих с высокими скоростями при высоких температурах и давлениях в многофазных системах, является их большая сложность.

Важнейшей задачей, стоящей перед химиками, является максимальное ускорение переноса положительных результатов лабораторных исследований новых процессов и технологических схем в промышленные масштабы.

Сложность переноса результатов лабораторного исследования на промышленный реактор состоит в том, что оптимальные условия процесса, найденные при малом масштабе опытов, оказываются уже неоптимальными при увеличении масштаба в сотни и тысячи раз. Это связано с тем, что при изменении масштаба закономерности кинетики протекания химической реакции, массопередачи и теплообмена меняются неодинаково. Можно, конечно, на аппарате промышленного типа провести дополнительные опыты и испытания и получить новые оптимальные условия - например, другую концентрацию веществ в системе или другую скорость протекания реагентов через реактор и т.д. Но это связано с большой затратой времени и средств и поэтому экономически невыгодно.

Выйти из создавшегося положения помогает моделирование.

*Моделирование* - это метод изучения различных объектов, при котором исследования проводят на модели, а результаты распространяют на оригинал. Модель может представлять собой уменьшенную по определенным законам (или иногда увеличенную) копию реального объекта (оригинала). Также моделью может быть и определенная система представлений о реальном объекте, выражаемая как совокупность математических структур: уравнений, функций, неравенств, таблиц, графических зависимостей. Такую модель обычно называют

математическим описанием объекта или его *математической моделью*.

*Математическое моделирование* - это создание математической модели, т.е. упрощенного математического описания объекта, процесса или явления, позволяющего не только описать объект, но и всестороннее ее исследовать с целью распространения результатов этих исследований на оригинал.

Разработка математических моделей, в частности моделей химических реакторов и протекающих в них химических процессов, является сложной задачей, т.к. требования к математической модели часто бывают противоречивыми.

Во-первых, модель должна быть проще реального объекта, наглядно и отчетливо передавать все качественные стороны интересующего нас явления. Если модель сложнее объекта, то для изучения явления легче было бы исследовать сам объект, а не модель.

Во-вторых, модель должна быть достаточно полной и подробной, точно передавать не только качественные, но и количественные закономерности явления. Если не выполнить этого требования, то затруднительно будет использовать разработанную модель для расчета химических реакторов в широких диапазонах изменения условий их работы.

Противоречивость этих требований очевидна: без обстоятельного изучения свойств системы не всегда ясно, какие факторы наиболее существенны, а какими можно пренебречь. Следовательно, разработка математической модели реактора всегда связана с поиском компромисса между указанными требованиями.

Правильно разработанная математическая модель химического реактора или химико-технологического процесса позволяет разработать и использовать систему автоматического управления и контроля реальным промышленным реактором, процессом или производством в целом с помощью ЭВМ.

### **3.2. Классификация химических реакций, лежащих в основе промышленных химико-технологических процессов**

В современной химии известно большое число различных химических реакций, многие из которых осуществляются в промышленных химических реакторах.

В химической технологии приняты следующие виды классификации химических реакций:

1. В зависимости от фазового состава реагентов и продуктов различают *гомогенные* и *гетерогенные* химические реакции.
2. В зависимости от механизма осуществления реакции различают *простые* (одностадийные) и *сложные* (многостадийные) реакции, в частности параллельные, последовательные и последовательно-параллельные реакции. Простыми называют реакции, для осуществления которых требуется преодоление лишь одного энергетического барьера (одна стадия). Сложные реакции включают в себя несколько параллельных или последовательных стадий (простых реакций).
3. В зависимости от числа молекул участвующих в элементарном акте химического взаимодействия различают *моно-, би- и тримолекулярные* реакции.
4. В зависимости от вида кинетического уравнения (зависимости скорости реакции от концентрации реагентов) реакции классифицируются по *порядку*. Порядком реакции называется сумма показателей степеней у концентраций реагентов в кинетическом уравнении. Существуют реакции первого, второго, третьего, дробного порядков. Реакциями нулевого порядка называют процессы, в которых скорость процесса сохраняется постоянной во времени.
5. В зависимости от того, применяются или не применяются катализаторы, различают *каталитические* и *некаталитические* реакции и соответственно химико-технологические процессы. Подавляющее большинство современных промышленных химических процессов являются каталитическими.

По тепловому эффекту химические реакции и процессы различают на *экзотермические*, сопровождающиеся выделением теплоты и уменьшением энтальпии реакционной системы ( $\Delta H < 0$ ); и *эндотермические*, сопровождающиеся поглощением теплоты и увеличением энтальпии реакционной системы ( $\Delta H > 0$ ).

### 3.3 Химические реакторы

Среди широкого круга аппаратов, которые используются в химической технологии, химические реакторы представляют самый представительный класс. Любой химический реактор в зависимости от метода его использования может являться либо *открытой* системой (т.е. системой, которая обменивается материальными и энергетическими потоками с окружающей средой), либо системой *закрытой* (которая обменивается с окружающей средой энергией, но не обменивается веществом).

Существуют два основных режима работы химических реакторов - *периодический* и *непрерывный* (в ряде случаев осуществляются промежуточные, полунепрерывные режимы). Аппарат, работающий в периодическом режиме, может быть и изолированной, и открытой системой. Непрерывно работающий реактор - обязательно открытая система, важнейшей особенностью которой является наличие в ней потоков - материальных, энергетических и др.

На протекание химических процессов в реакторах оказывает влияние целый ряд факторов - различие по времени пребывания частиц реагентов и продуктов в аппарате (одни находятся в зоне реакции дольше, другие - меньше); различие значений температуры, концентрации, а следовательно, и скоростей реакции в различных частях реактора.

Реактор непрерывного действия может работать либо в стационарном режиме, либо в нестационарном. Стационарным называется режим, все параметры которого не изменяются во времени: в любой точке реакционного пространства все концентрации, скорости реакций и температура остаются постоянными. В нестационарном режиме хотя бы часть параметров меняется во времени.

Оптимальность работы реактора характеризуется количеством целевого продукта, получаемого в единицу времени при заданных условиях с единицы объема (площади поверхности) аппарата. Поэтому главной задачей при моделировании и изучении процессов, протекающих в аппаратах любого типа, является установление функциональной зависимости времени пребывания  $t$  реагентов в объеме реактора от различных факторов:

$$t = f(x_i, C_{oi}, v), \quad (1)$$

где -  $x_i$  - заданная степень превращения;  $C_{oi}$  - начальные концентрации реагентов;  $v$  - скорость химической реакции.

Уравнение (1) называется характеристическим уравнением реактора.

Исходным уравнением для получения характеристического уравнения реактора любого типа является уравнение материального баланса, учитывающее массовые расходы компонентов реакционной системы. Однако при построении модели реактора (и многих других видов химического оборудования) материальный баланс должен рассматриваться совместно с энергетическим балансом, например, тепловым.

В настоящей лабораторной работе для упрощения моделирования реактора все процессы будут рассматриваться как протекающие в изотермических условиях.

Упрощение реальных систем и выделение наиболее характерных черт их работы привело к появлению понятия об *идеальных реакторах*. Идеальные реакторы, как и любая идеализация, - это абстракция, которую весьма сложно осуществить на практике. Однако ясность физической картины и простота их математического описания чрезвычайно удобны для анализа протекания в них химических процессов.

Обычно рассматривают два типа идеальных реакторов. Первый характеризуется тем, что материальный поток в нем движется совершенно равномерно. Все частицы вещества имеют одинаковую скорость и, следовательно, одинаковое время пребывания в объеме реактора. Фронт материального потока движется в таком реакторе подобно твердому

поршню и поэтому такие аппараты называются аппаратами с поршневым течением, или *реакторами идеального вытеснения*. Конструктивно реактор идеального вытеснения представляет собой трубу с большим отношением ее длины к диаметру. Реакторы идеального вытеснения - аппараты исключительно непрерывного действия.

Другой тип идеального аппарата - *реактор идеального перемешивания*. Такой реактор может функционировать как периодически, так и непрерывно.

Реактор идеального перемешивания периодического действия, который будет изучаться в данной лабораторной работе, представляет собой сосуд с мешалкой. Мощность мешалки обеспечивает такую интенсивность перемешивания, что в каждый данный момент времени концентрация реагентов одинакова по всему объему реактора и меняется лишь во времени, по мере протекания химической реакции (рис.1).

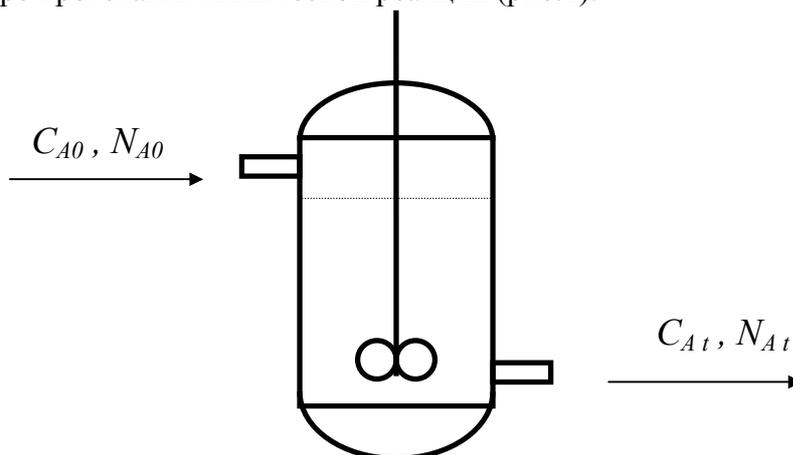


Рис.1. Схема реактора идеального перемешивания периодического действия.

$C_{A0}$  ,  $N_{A0}$  - начальная концентрация и исходное количество реагента  $A$  в реакционной смеси (при загрузке в реактор);  $C_{At}$  ,  $N_{At}$  - тоже в момент времени  $t$ .

Так как реакционная смесь интенсивно перемешивается, то все параметры в реакторе идеального перемешивания одинаковы по всему его объему в любой момент времени.

### 3.4 Лабораторная работа

В настоящей лабораторной работе необходимо изучить процесс построения математической модели простой реакции первого порядка в реакторе идеального перемешивания периодического действия.

Как уже отмечалось, при построении модели принимается постоянной температура реакционной среды в течение всего процесса и не учитываются энергетические эффекты химической реакции.

По указанной преподавателем методике проведите кинетический эксперимент и получите табличную зависимость концентрации исходного реагента от времени, прошедшего от начала реакции. Для каждого времени  $t$  и концентрации реагента в этот момент времени  $C_t$  рассчитайте константу скорости по формуле:

$$k = 1/t \ln(C_0/C_t) \quad (2)$$

Полученные данные внесите в соответствующие графы таблицы 2.

Таблица 2

№ п/п	время от начала реакции, $t, c$	Концентрация реагента и константа скорости			
		экспериментальная		модельная	
		$C_{\text{эксп}}$	$k_{\text{эксп}}$	$C_{\text{мод}}$	$k_{\text{мод}}$
1	0	$C_0$	-	$C_0$	-
2					
3					
4					
5					
...					

Если исследуемая реакция является реакцией первого порядка, то константа скорости вычисленная по уравнению (2) для любого момента времени будет постоянной в пределах неизбежных ошибок опыта.

Если в ходе кинетического эксперимента используется вещество в газообразном состоянии, то отношение концентраций можно заменить отношением парциальных давлений исходного вещества в те же моменты времени, так как давление газа пропорционально его концентрации (при  $T = \text{const}$ ).

Детерминированная математическая модель (*детерминированная модель, в отличие от случайной, полностью определяется видом функциональной зависимости и значениями ее параметров*) исследуемого процесса для простой химической реакции первого порядка типа  $A \rightarrow B$  должна включать уравнение материального баланса по каждому компоненту с учетом протекания химической реакции.

Математическое описание функционирования данной химико-технологической системы в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений будет выглядеть так:

$$\begin{aligned} dC_A / dt &= -v_A \\ dC_B / dt &= v_B \end{aligned} \quad (3).$$

Скорость образования продуктов реакции  $v_B$  имеет положительный знак, а скорость исчезновения исходных  $v_A$  отрицательный, так как с течением времени концентрация первых увеличивается, а вторых уменьшается.

Согласно закону действующих масс скорость простой химической реакции прямо пропорциональна произведению концентраций реагирующих веществ:

$$\begin{aligned} v_A &= k C_A \\ v_B &= k C_A \end{aligned} \quad (4),$$

где  $k$  - константа скорости.

Подстановка (4) в (3) позволяет получить окончательный вид искомой модели:

$$\begin{aligned} dC_A / dt &= -k C_A \\ dC_B / dt &= k C_A \end{aligned} \quad (5)$$

Кинетика расходования реагента  $A$  и образования продукта  $B$  описывается соответственно уравнениями [20]:

$$\begin{aligned} C_A &= C_{A0} e^{(-kt)} \\ C_B &= C_{B0} + C_{A0} [1 - e^{(-kt)}] \end{aligned} \quad (6)$$

Скорость реакции может быть выражена в различных единицах, в зависимости от способа выражения концентрации, например:  $c^{-1}$ , моль/(л · с), моль / (см<sup>3</sup> · с); в физических процессах - числом молекул в 1 см<sup>3</sup> в 1 с; в реакциях между газами, - в Па/с или мм.рт.ст./с.

Для характеристики скорости реакций первого порядка (и процессов радиоактивного распада) наряду с константой скорости часто пользуются величиной, называемой *временем полупревращения (периодом полураспада)*  $\tau_{1/2}$ , равным промежутку времени, в течение которого реагирует половина взятого количества вещества. Принимая  $C\tau = C_0 / 2$  можно

рассчитать время достижения этой концентрации [21]:

$$\tau_{1/2} = (1/k) \ln 2 = 0.6932/k \quad (7).$$

Это соотношение показывает, что константа скорости реакции первого порядка обратно пропорциональна периоду полураспада.

Компьютерное моделирование кинетического эксперимента в данной лабораторной работе реализовано путем программного решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений методом Рунге-Кутты четвертого порядка [17]. Метод Рунге-Кутты четвертого порядка сводится к численному интегрированию дифференциальных уравнений и является наиболее распространенным численным методом решения подобных задач т.к. обеспечивает достаточно высокую точность вычислений, обладает малой погрешностью и не имеет систематического накопления ошибок. Графическая оболочка программы, реализующей этот метод, выполнена в виде многооконного текстового процессора с использованием стандартной системы меню и наглядно иллюстрирует все этапы моделирования.

Известно, что система обыкновенных дифференциальных уравнений имеет бесконечное множество решений. Для того, чтобы выбрать требуемое решение, необходимо задать начальные условия (сформулировать задачу Коши).

Условиями задачи Коши в рассматриваемом нами варианте являются:

- начальное значение независимой переменной (время начала реакции  $t_0$ );
- предельное значение независимой переменной (время  $t$ , на которое требуется рассчитать значения концентраций веществ реагентов и продуктов);
- начальные значения всех зависимых переменных (начальные значения концентраций компонентов  $C_{0A}$  и  $C_{0B}$ ).

Начальные условия для первого интервала времени моделируемой реакции типа  $A \rightarrow B$  будут следующие:  $t_0 = 0$ ,  $C_{0B} = 0$ ,  $C_{0A}$  и  $t_1$  - задаются по указанию преподавателя.

Ввод значения последнего параметра, определяющего режим работы программы, активизирует процесс моделирования и появление результатов в соответствующем экранном окне. При этом результат выводится как в табличном виде, так и в виде графической зависимости концентрации реагента от времени.

Полученные методом моделирования значения концентрации реагента и константы скорости необходимо внести в соответствующие графы правой части таблицы 3.1. Также необходимо записать и проанализировать рассчитанное значение времени полупревращения реагента.

Следующим этапом данной лабораторной работы является изучение влияния температуры на скорость реакции. Для этого необходимо внести изменения параметризации полученной математической модели. Согласно закону Аррениуса константа скорости может быть рассчитана по уравнению [20]:

$$k = A \exp(-E_A/RT) \quad \text{или} \\ \ln k = \ln A - E_A/RT \quad (8),$$

где  $E_A$  - энергия активации;  $A$  - постоянная Аррениуса, предэкспоненциальный множитель, определяемый природой реагентов и среды;  $R = 8.31441$  Дж/(К·моль) - газовая постоянная;  $T$  - абсолютная температура.

По указанию преподавателя (в соответствии с приложением 2, индивидуальным заданием и уравнением Аррениуса) рассчитайте значение константы скорости для заданных температур. Полученные значения последовательно введите в соответствующее поле экранного окна моделирующей программы и рассчитайте новые значения концентраций реагентов и продуктов реакции. Сделайте вывод о влиянии изменения температуры на скорость моделируемого процесса.

В заключение отметим, что полученная математическая модель является лишь определенным (в рамках принятых допущений) аналогом реальной химико-технологической системы. Значения переменных, получаемые на модели и объекте, могут существенно различаться. В связи с этим возникает задача установления адекватности полученной модели

реальному объекту и внесения, в случае необходимости, изменений в параметры модели, до тех пор пока она не будет соответствовать установленным критериям адекватности. В данной лабораторной работе (с целью ее упрощения) не изучаются способы установления адекватности математической модели.

#### IV. ПРИМЕНЕНИЕ КОМПЬЮТЕРНОГО ТЕСТИРОВАНИЯ ПРИ ИЗУЧЕНИИ ХИМИЧЕСКИХ ДИСЦИПЛИН

На кафедре инженерной экологии и химии Брестского государственного технического университета при изучении химических дисциплин в качестве тестирующей компьютерной программы применяется разработанная научным сотрудником кафедры фотографии и технологии обработки светочувствительных материалов Санкт-Петербургского государственного университета кино и телевидения, к.т.н. А.Б. Смирновым обучающе-контролирующая система «Коллоквиум».

К достоинствам этой системы относятся простота ее установки и настройки на любом IBM PC-совместимом персональном компьютере, с любым типом монитора (CGA, EGA, VGA, sVGA) и минимальным объемом оперативной памяти. При этом тип ПК существенным образом не влияет на скорость работы системы и, следовательно, на эффективность применения методики в целом. Это позволяет применять для обучающе-тестирующих целей парк устаревших на сегодняшний день моделей ПК, которые приобретались учебными заведениями в предыдущие годы, а теперь зачастую практически не используются.

Система «Коллоквиум» разработана таким образом, что позволяет проводить контрольные опросы на любую тему по заранее подготовленным вопросам. Благодаря наличию возможности выбора различных систем оценки и различных типов вопросов система является достаточно гибким инструментом для проведения контрольных опросов различной сложности.

Для оценки знаний студентов в программе «Коллоквиум» преподаватель имеет возможность выбрать одну из двух систем: *фиксированную* и *гибкую*.

При работе с фиксированной системой задается общее количество вопросов, на которое будет предложено ответить студенту при тестирующем опросе (не более 30). Задаются также и критерии оценки: количество верных ответов, необходимое для получения соответствующей оценки («отлично», «хорошо», «удовлетворительно» и «неудовлетворительно»). После того как опрашиваемый ответит на все вопросы, количество правильных ответов, которое он дал сравнивается с установленными критериями. Оценка выставляется по тому в какой из интервалов попадает число правильных ответов. Иными словами - фиксированная оценка - это оценка по количеству правильных ответов.

При тестировании с использованием гибкой системы задается минимальное количество правильных ответов и максимальное количество неправильных ответов. Тестирование продолжается до тех пор, пока опрашиваемый либо наберет необходимое количество правильных ответов, либо даст заданное количество неверных ответов. При этом количество вопросов может быть различным. В этом варианте тестирования оценка выставляется по 3-х бальной системе: «Зачтено» - ставится в случае если экзаменуемый не дал ни одного неверного ответа; «Незачтено» - ставится в случае, если количество неверных ответов достигло максимально заданного значения; «Необходима беседа с преподавателем» - ставится во всех остальных случаях.

Таким образом, гибкая оценка - это 3-х бальная оценка по количеству неверных ответов.

При работе системы «Коллоквиум» номера вопросов на которые студент не ответил (а также неправильные ответы) автоматически фиксируются в протоколе опроса, а по окончании тестирования выводятся на экран вместе с полученной оценкой.

В протоколе опроса кроме этого регистрируется фамилия опрашиваемого, номер группы, дата проведения и результат тестирования.

### Обработка почвы

*Обработка почвы* — это механическое воздействие на нее рабочими органами машин и орудий с целью создания оптимальных условий для жизни культурных растений, увеличения плодородия и повышения противозерозионной устойчивости почв.

В зависимости от характера и степени возделывания рабочими органами почвообрабатывающих орудий и машин на обрабатываемый слой различают следующие способы обработки почвы под культуры.

**Отвальный** — воздействие рабочими органами почвообрабатывающих орудий и машин на почву с полным или частичным оборачиванием обрабатываемого слоя. Как правило, данный способ осуществляется при обработке плугами с лемешно-отвальными корпусами.

**Безотвальный** — воздействие рабочими органами почвообрабатывающих орудий и машин на почву без изменения расположения генетических горизонтов в вертикальном направлении с целью рыхления почвы. При этом способе послеуборочные остатки сохраняются на поверхности или частично перемешиваются с верхним слоем почвы.

**Комбинированные способы** — сочетание отвального и безотвального способов обработки по глубине и срокам осуществления.

Применение того или иного способа обработки обусловлено его задачами, типом почвы и степенью ее окультуренности, а также климатическими условиями и биологическими особенностями возделываемых культур.

**Поверхностная обработка** — механическое воздействие почвообрабатывающими орудиями и машинами на поверхность почвы при глубине хода рабочих органов до 16 см.

К приемам поверхностной обработки относятся прикатывание, боронование, дискование, лущение, культивация, шлейфование, мелование, фрезерование, междурядная обработка.

**Средняя (обычная) обработка** — воздействие почвообрабатывающими орудиями и машинами на глубину 16—24 см. Приемами такой обработки являются вспашка (с оборотом пласта — на 180°, со взметом пласта — на 135°, культурная плугом с предплужником), безотвальное рыхление, плоскорезная обработка.

**Глубокая обработка** — это периодическое воздействие почвообрабатывающими орудиями и машинами на почву с целью увеличения мощности обрабатываемого слоя на глубину 25—35 см. Сюда относится вспашка с припахиванием нижележащего слоя почвы, чизелевание, вспашка плугами с предплужниками.

**Сверхглубокая обработка** — это одноразовое или периодическое воздействие на почву специальными почвообрабатывающими орудиями и машинами с целью коренного изменения генетического сложения почвы на глубину более 35 см. Это прежде всего плантажная вспашка плугом на глубину до 60 см для создания специфических условий при закладке садов, ягодников.

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

Кинетические параметры гомогенных реакций первого порядка [25]

Реакция	$A, c^{-1}$	$E_A,$ кДж/моль
Реакции между молекулами		
А. Разложение		
$C_2H_5Br \rightarrow C_2H_4 + HBr$	$7.2 * 10^{12}$	218.0
$C_2H_5Cl \rightarrow C_2H_4 + HCl$	$4.0 * 10^4$	247.5
$CH_3CHCl_2 \rightarrow CH_2=CHCl + HCl$	$1.3 * 10^{12}$	207.8
$CCl_3CH_3 \rightarrow CCl_2=CH_2 + HCl$	$3.2 * 10^{12}$	201.0
$CH_3COOC_2H_5 \rightarrow CH_3COOH + C_2H_4$	$3.2 * 10^{12}$	200.5
<i>цикло</i> - $(CH_3CHO)_3 \rightarrow 3CH_3CHO$	$1.3 * 10^{15}$	185.5
$N_2O_5 \rightarrow N_2O_4 + 1/2O_2$	$4.6 * 10^{13}$	103.5
$N_2O_4 \rightarrow 2NO_2$	$1.0 * 10^{16}$	54.4
Б. Изомеризация		
<i>транс</i> - Дихлорэтилен $\rightarrow$ <i>цис</i> - Дихлорэтилен	$4.9 * 10^{12}$	175.8
Циклопропан $\rightarrow$ пропилен	$1.5 * 10^{15}$	272.8
Винилаллиловый эфир $\rightarrow$ аллилацетальдегид	$5.0 * 10^{11}$	128.3
Реакции с участием атомов и радикалов		
$CCl_4 \rightarrow CCl_3 + Cl$	$2.0 * 10^{13}$	356.2
$CH_3Cl \rightarrow CH_3 + Cl$	$2.0 * 10^{13}$	356.2
$C_2H_6 \rightarrow 2CH_3$	$2.0 * 10^{13}$	354.0
$C_2H_5Br \rightarrow C_2H_5 + Br$	$2.0 * 10^{13}$	225.2
$C_2H_5I \rightarrow C_2H_5 + I$	$2.0 * 10^{13}$	216.0
$C_6H_5Br \rightarrow C_6H_5 + Br$	$2.0 * 10^{13}$	297.2
$C_6H_5CH_2Br \rightarrow C_6H_5CH_2 + Br$	$2.0 * 10^{13}$	211.8
$C_6H_5C_2H_5 \rightarrow C_6H_5CH_2 + CH_3$	$2.0 * 10^{13}$	264.2

## ЛИТЕРАТУРА

1. Машбиц Е.И. Компьютеризация обучения: проблемы и перспективы. М.:Знание, 1985.
2. Гладковский В.И., Гладышук А.А., Маркевич К.М. Рейтинговая система аттестации студентов. - Брест: БГТУ, 2001- 54 с.
3. Устынюк Ю.А. Химия и химическое образование на рубеже веков: смена целей, методов и поколений специалистов // Рос.хим.ж. (Ж. Рос. хим. об-ва им. Д.И. Менделеева), 2001, т.XLV, №2, с.83-91.
4. Мартыненко Ю.Г. Применение новых информационных технологий в преподавании фундаментальных наук // Соросовский образовательный журнал, 1997, №3, с.130-138.
5. Donald R. Bourgue, Gaylene R. Carlson Hands-on versus computer stimulation methods in Chemistry // Journal of Chemical Education, 1987, vol. 64, No.3, p. 233-236.
6. Lorie Juhl General Chemistry in Technical Education // Journal of Chemical Education, 1996, vol. 73, No.1, p. 72-77.
7. Strokach P.P., Khaletsky V.A. Peculiarities of Teaching Chemistry to Students of Non-Chemical Specialities at Higher Technical Institutions. "How to Read Chemistry" The Materials of Second International Workshop on the Questions of Chemical Education. The UNESCO Associated Center for Chemical Education. 01-05.02.2000, Minsk p.61-63
8. Ройтман Л.А. Конференция «Влияние техники на окружающую среду» // Экология, 1997, №3, с.239-240.
9. Ломов Б.Ф. Научно-технический прогресс и средства умственного развития // Психологический журнал, 1985. Т.6., №6.
10. Shitozawa J.J. Исторические аспекты использования компьютеров в химии // Kagaku tokyoiku. Chem. Educ. 1993. V. 41. N. 1. P. 6-8. (Цит. по РЖ Химия 15 А5, 1993).
11. Dubravcic M.F. Practical alternatives to laboratory in a basic chemistry course // J. Chem. Educ. 1979. V. 56. № 4. P.235-238.
12. Сергеева Т.А. Об обучающих программах для ЭВМ //Химия в школе. 1986, №6, с.45-48.
13. Эберт К., Эдерер Х. Компьютеры. Применение в химии / Пер. с нем. -М: Мир, 1988.-415 с.
14. Джонсон К. Численные методы в химии /Пер. с англ. - М: Мир, 1983. - 504 с.
15. Кафаров В.В. Моделирование химических процессов. - М: Знание, 1968. - 62 с.
16. Кафаров В.В., Глебов М.Б. Математическое моделирование основных процессов химических производств: учебн. пособие для вузов. - М: Высш. шк., 1991. -400 с.
17. Гнатюк С.П., Чураева Л.А. Применение ЭВМ в химии и химической технологии. - СПб: РИО СПИКиТ, 1998, - 72 с.
18. Кутепов А.М., Бондарева Т.И., Беренгартен М.Г. Общая химическая технология: Учеб. для техн. вузов. - 2-е изд.- М: Высш. шк., 1990.- 520 с.
19. Грановский В.А., Сирая Т.Н. Методы обработки экспериментальных данных при измерениях. - Л.: Энергоатомиздат, 1990. - 288 с.
20. Денисов Е.Т., Саркисов О.М., Лихтенштейн Г.И. Химическая кинетика. - М.: Химия, 2000.- 568 с.
21. Киреев В.А. Краткий курс физической химии . - М.: Химия, 1978.- 624 с.
22. Фридман Л.М. Наглядность и моделирование в обучении. М.: Знание, 1984.
23. Рысс В.Л. Контроль знаний учащихся. - М: Педагогика, 1982.
24. Мартыненко Ю.Г. Применение новых информационных технологий в преподавании фундаментальных наук // Сорос. образ. ж. 1997. N 3. С. 130 -138.
25. Краткий справочник физико-химических величин /Под ред. А.А.Равделя и А.М.Пономаревой. - Л.: Химия, 1983.- 232 с.



# УЧЕБНОЕ ИЗДАНИЕ

Составители:

БАСОВ Сергей Владимирович  
ЯЛОВАЯ Наталья Петровна  
ГОЛОВАЧ Анна Петровна  
ХАЛЕЦКИЙ Виталий Анатольевич  
ГНАТЮК Сергей Павлович

Обучающие имитационно-моделирующие компьютерные программные средства в изучении  
экологических и химических дисциплин

## МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ

к лабораторным и практическим работам по курсам «Химия», «Общая, неорганическая и физическая химия», «Органическая химия», «Основы экологии», «Отраслевая экология»  
для студентов специальностей:

- 36 01 01 Технология машиностроения,
- 36 01 03 Технология и оборудование машиностроительного производства,
- 37 01 06 Техническая эксплуатация автомобилей,
- 53 01 01 Автоматизация технологических процессов и производств,
- 70 01 01 Производство строительных изделий и конструкций,
- 70 02 01 Промышленное и гражданское строительство,
- 70 03 01 Автомобильные дороги,
- 70 04 03 Водоотведение, водоснабжение и охрана водных ресурсов,
- 74 05 01 Мелиорация и водное хозяйство.

Ответственный за выпуск: БАСОВ С.В.

Редактор: СТРОКАЧ Т. В.

---

Подписано к печати \_\_\_\_\_ Формат 60×84 1/16

Гарнитура Times New Roman. Бумага «Чайка».

Усл. п. л. \_\_\_\_\_ Уч. изд. л. \_\_\_\_\_ Тираж \_\_\_\_\_ экз.

Заказ № \_\_\_\_\_

Отпечатано на ризографе Учреждения образования "Брестский  
государственный технический университет".

224017, Брест, ул. Московская, 267