Минобрнауки России

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение

высшего образования

«Санкт-Петербургский государственный технологический институт

(технический университет)»

ЗАДАНИЕ НА КУРСОВОЙ ПРОЕКТ

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Направление подготовки** | | 09.03.01 Информатика и вычислительная техника | |
| **Направленность** | | Автоматизированные системы обработки информации  и управления | |
| **Факультет** | | Информационных технологий и управления | |
| **Кафедра** | | Систем автоматизированного проектирования и управления | |
| **Учебная дисциплина** | | Программирование | |
| **Курс** | 1 | **Группа** | 494 |
| **Студент** | | Хлебников Роман Александрович | |

|  |  |
| --- | --- |
| **Тема:** | Программный комплекс для определения константы скорости химической реакции 2A = 2B + C |

|  |  |
| --- | --- |
| **Цель работы:** | Расчёт константы скорости реакции и её оценка. |

**Исходные данные по проекту:**

1 Дронов, В. А. Python 3 и PyQt 5. Разработка приложений / В. А Дронов, Н.А. Прохоренок. — 2-е изд. — СПб.: BHV, 2019. — 832 с.

2 Любанович, Б. Простой Python. / Б. Любанович. — СПб.: Питер, 2017 — 480 с.

3 Кубасов, А. А. Химическая кинетика и катализ. Часть 1 : Учебное пособие. /    А. А. Кубасов. — М.: Изд-во МГУ им. М. В. Ломоносова, 2004. — 144 с.

4 Иванова, Г. С. Объектно-ориентированное программирование / Г. С. Иванова,

   Т. Н. Ничушкина, Е. К. Пугачёв. — Изд. 3-е, стер. — М.: Изд-во МГТУ, 2007. — 415 с.

5 Чистякова, Т. Б. Синтез и анализ математических моделей кинетики химических     реакций : учебное пособие / Т. Б. Чистякова, Л. В. Гольцева, А. М. Островская, Ю. В.     Островский. — СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2002. — 70 с.

6 Гартман, Т. Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических    процессов : учебное пособие / Т. Н. Гартман, Д. В. Клушин. — М.:    Академкнига, 2008. — 70 с.

**Перечень вопросов, подлежащих разработке:**

1 Ознакомиться с теорией по синтезу и анализу математических моделей (ММ) кинетики химических реакций.

2 Выполнить постановку задачи по исследованию кинетики химической реакции.

3 Составить формализованное описание задачи. Разработать структуру входных (экспериментальных данных по изменению концентрации компонентов во времени) и выходных данных (порядок реакции, константа скорости реакции).

4 Уточнить методы решения математической задачи.

5 Разработать алгоритм (блок-схему) для определения порядка химической реакции и константы скорости химической реакции.

6 Спроектировать структуру программы.

7 Разработать пользовательский интерфейс.

8 Выполнить предварительную оценку кинетических констант с использованием метода регрессионного анализа.

9 Провести статический анализ результатов.

10 Составить программу, реализующую поставленную задачу.

11 Описать структуру данных и алгоритмов.

12 Описать структуру программы.

13 Протестировать работоспособность программного обеспечения.

**Перечень графического материала:**

1 Постановка задачи исследования кинетики химической реакции.

2 Формализованное описание задачи. Структура входных и выходных данных.

3 Метод регрессионного анализа для решения задач.

4 Алгоритм (блок-схема) определения порядка химической реакции и константы скорости химической реакции.

5 Функциональная структура программного обеспечения.

6 Результаты проверки адекватности разработанной модели.

7 Примеры тестирования работоспособности программного обеспечения.

8 Характеристика разработанного программного обеспечения.

**Требования к программному обеспечению:**

Программное обеспечение: Microsoft Windows 10, MS Office Word 2019, MS Office Power Point 2019, Python 3.7.9, Qt Designer, JetBrains PyCharm 2020.1

**Требования к аппаратному обеспечению:**

Шестиядерный процессор Intel Core I7 8750H с тактовой частотой 2.2 ГГц., 16 ГБ оперативной памяти, от 10 Гб до 20 Гб свободного места на жестком диске, видеокарта Nvidia GeForce GTX 1060

|  |  |
| --- | --- |
| **Дата выдачи задания:** |  |
| **Дата предоставления курсового проекта к защите:** |  |

|  |  |
| --- | --- |
| Заведующая кафедрой, проф. | Т.Б. Чистякова |
| Лектор, доц. | И.Г. Корниенко |
| Консультант, ст. преп. | А.К. Федин |
| Задание принял к выполнению | Р.А. Хлебников |