

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Котова Лариса Анатольевна
Должность: Директор филиала
Дата подписания: 22.09.2023 10:44:23
Уникальный программный ключ:
10730ffe6b1ed036b744b6e9d97700b86e5c04a7

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»
Новотроицкий филиал

Аннотация рабочей программы дисциплины

**Моделирование химико-технологических
процессов**

Закреплена за подразделением Кафедра математики и естествознания (Новотроицкий филиал)

Направление подготовки 18.03.01 Химическая технология

Профиль

Квалификация **Бакалавр**

Форма обучения **очная**

Общая трудоемкость **4 ЗЕТ**

Часов по учебному плану	144	Формы контроля в семестрах: зачет 8
в том числе:		
аудиторные занятия	54	
самостоятельная работа	90	

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	8 (4.2)		Итого	
	10			
Неделя	УП	РП	УП	РП
Лекции	18	18	18	18
Практические	36	36	36	36
В том числе инт.	12	12	12	12
Итого ауд.	54	54	54	54
Контактная работа	54	54	54	54
Сам. работа	90	63	90	63
Итого	144	144	144	144

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ

1.1	1) свободное владение основными методами построения, численного решения, реализации (представления) и исследования с помощью ЭВМ математических моделей;
1.2	2) освоение существующих основных математических моделей, используемых при описании химико-технологических процессов;
1.3	3) свободное чтение современных математических моделей в области профессиональной компетенции (коксохимия).

2. МЕСТО В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Блок ОП:		Б1.В
2.1	Требования к предварительной подготовке обучающегося:	
2.1.1	Курсовая научно-исследовательская работа	
2.1.2	Физико-химические основы нефтяных дисперсных систем	
2.1.3	Химическая технология топлива и углеродных материалов	
2.1.4	Химические реакторы	
2.1.5	Аналитическая химия и физико-химические методы анализа	
2.1.6	Массообменные процессы химической технологии	
2.1.7	Теория вероятностей и математическая статистика	
2.1.8	Начертательная геометрия и инженерная графика	
2.1.9	Физика	
2.1.10	Процессы и аппараты химической технологии	
2.1.11	Дополнительные главы физической химии	
2.2	Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:	
2.2.1	Дисциплины по выбору Б1.В.ДВ.4	
2.2.2	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы	

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ФОРМИРУЕМЫМИ КОМПЕТЕНЦИЯМИ

ПК-1.11: Способностью выявлять и устранять отклонения от режимов работы технологического оборудования и параметров технологического процесса	
Знать:	
ПК-1.11-33 основы системного подхода	
УК-9.2: способность осуществлять моделирование, анализ и экспериментальные исследования для решения проблем в профессиональной области	
Знать:	
УК-9.2-31 основные подходы к построению математических моделей (аналитический, экспериментальный и комбинированный подходы)	
ПК-1.11: Способностью выявлять и устранять отклонения от режимов работы технологического оборудования и параметров технологического процесса	
Знать:	
ПК-1.11-31 основные методы первичной обработки данных	
ПК-1.11-32 основы регрессионного анализа	
ПК-3.1: Способностью планировать и проводить физические и химические эксперименты, проводить обработку их результатов и оценивать погрешности, выдвигать гипотезы и устанавливать границы их применения, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования	
Знать:	
ПК-3.1-31 научные основы анализа на грубые ошибки	
УК-9.2: способность осуществлять моделирование, анализ и экспериментальные исследования для решения проблем в профессиональной области	
Знать:	
УК-9.2-33 особенности моделирования скорости протекания химических реакций, основные модели в области профессиональной деятельности (коксохимия, прогноз качества кокса по показателям M25 и M10)	

УК-9.2-32 особенности физико-химического моделирования равновесного состава раствора
ПК-3.1: Способностью планировать и проводить физические и химические эксперименты, проводить обработку их результатов и оценивать погрешности, выдвигать гипотезы и устанавливать границы их применения, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования
Знать:
ПК-3.1-32 метод планирования двухуровневого полнофакторного эксперимента
ПК-3.1-33 метод планирования дробного факторного эксперимента
ПК-1.2: Готовностью применять аналитические и численные методы решения поставленных задач, использовать современные информационные технологии, проводить обработку информации с использованием прикладных программных средств профессиональной деятельности, использовать сетевые компьютерные технологии и базы данных в своей профессиональной области, пакеты прикладных программ для расчета технологических параметров оборудования
Знать:
ПК-1.2-33 основные численные методы решения дифференциальных уравнений (метод Эйлера, модифицированный метод Эйлера, метод Рунге-Кутты), особенности решения задач в пакетах прикладных программ
ПК-1.2-32 основные численные методы решения нелинейных уравнений (метод половинного деления, метод хорд, метод Ньютона)
ПК-1.2-31 возможности наиболее распространённых пакетов прикладных программ для численного решения различных математических задач
Уметь:
ПК-1.2-У2 численно решать нелинейные уравнения (метод половинного деления, метод хорд, метод Ньютона)
ПК-1.2-У1 применять пакеты прикладных программ для решения вопросов, связанных с моделированием
ПК-3.1: Способностью планировать и проводить физические и химические эксперименты, проводить обработку их результатов и оценивать погрешности, выдвигать гипотезы и устанавливать границы их применения, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования
Уметь:
ПК-3.1-У3 планировать дробный факторный эксперимент с любым числом факторов и дробностью
ПК-3.1-У2 планировать двухуровневые полнофакторные эксперименты с любым количеством факторов
ПК-3.1-У1 проводить анализ на грубые ошибки
ПК-1.11: Способностью выявлять и устранять отклонения от режимов работы технологического оборудования и параметров технологического процесса
Уметь:
ПК-1.11-У2 на основе статистических методов сопоставлять работу аналогичного оборудования (анализ однородности средних)
ПК-1.2: Готовностью применять аналитические и численные методы решения поставленных задач, использовать современные информационные технологии, проводить обработку информации с использованием прикладных программных средств профессиональной деятельности, использовать сетевые компьютерные технологии и базы данных в своей профессиональной области, пакеты прикладных программ для расчета технологических параметров оборудования
Уметь:
ПК-1.2-У3 численно решать простые дифференциальные уравнения и системы дифференциальных уравнений (нежёсткие системы)
ПК-1.11: Способностью выявлять и устранять отклонения от режимов работы технологического оборудования и параметров технологического процесса
Уметь:
ПК-1.11-У1 проводить первичную обработку статистических данных
УК-9.2: способность осуществлять моделирование, анализ и экспериментальные исследования для решения проблем в профессиональной области
Уметь:
УК-9.2-У1 составлять примерные схемы проходящих химических реакций
УК-9.2-У2 устанавливать линейную зависимость или независимость химических реакций
УК-9.2-У3 сводить систему нелинейных уравнений к одному общему нелинейному

ПК-1.11: Способностью выявлять и устранять отклонения от режимов работы технологического оборудования и параметров технологического процесса
Уметь:
ПК-1.11-У3 учитывать слияние подсистем на общее поведение системы
УК-9.2: способность осуществлять моделирование, анализ и экспериментальные исследования для решения проблем в профессиональной области
Владеть:
УК-9.2-В1 навыками применения справочной литературы
УК-9.2-В3 приёмами поиска экстремума по уравнению модели
УК-9.2-В2 навыками расчёта недостающих термодинамических параметров (метод Тёмкина-Шварцмана)
ПК-1.2: Готовностью применять аналитические и численные методы решения поставленных задач, использовать современные информационные технологии, проводить обработку информации с использованием прикладных программных средств профессиональной деятельности, использовать сетевые компьютерные технологии и базы данных в своей профессиональной области, пакеты прикладных программ для расчета технологических параметров оборудования
Владеть:
ПК-1.2-В3 навыками работы в специализированных пакетах прикладных программ
ПК-1.11: Способностью выявлять и устранять отклонения от режимов работы технологического оборудования и параметров технологического процесса
Владеть:
ПК-1.11-В1 навыками чтения химических схем превращения
ПК-1.2: Готовностью применять аналитические и численные методы решения поставленных задач, использовать современные информационные технологии, проводить обработку информации с использованием прикладных программных средств профессиональной деятельности, использовать сетевые компьютерные технологии и базы данных в своей профессиональной области, пакеты прикладных программ для расчета технологических параметров оборудования
Владеть:
ПК-1.2-В1 навыками работы и представления экспериментальных данных в табличном процессоре
ПК-1.2-В2 навыками численного решения нелинейных и дифференциальных уравнений в табличном процессоре
ПК-1.11: Способностью выявлять и устранять отклонения от режимов работы технологического оборудования и параметров технологического процесса
Владеть:
ПК-1.11-В2 навыками чтения схем, оформленных в аппаратном виде
ПК-3.1: Способностью планировать и проводить физические и химические эксперименты, проводить обработку их результатов и оценивать погрешности, выдвигать гипотезы и устанавливать границы их применения, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования
Владеть:
ПК-3.1-В2 определять значимость факторов, входящих в модель, полученную на основе полнофакторного эксперимента
ПК-3.1-В3 определять значимость факторов, входящих в модель, полученную на основе дробнофакторного эксперимента
ПК-1.11: Способностью выявлять и устранять отклонения от режимов работы технологического оборудования и параметров технологического процесса
Владеть:
ПК-1.11-В3 навыками чтения принципиальных схем
ПК-3.1: Способностью планировать и проводить физические и химические эксперименты, проводить обработку их результатов и оценивать погрешности, выдвигать гипотезы и устанавливать границы их применения, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования
Владеть:
ПК-3.1-В1 определять значимость факторов, входящих в готовую модель

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ

Код занятия	Наименование разделов и тем /вид занятия/	Семестр / Курс	Часов	Формируемые индикаторы компетенций	Литература и эл. ресурсы	Примечание	КМ	Выполняемые работы
	Раздел 1. Общие вопросы моделирования							
1.1	1.1 Общее понятие модели. Многообразие форм представления модели. Понятие о математическом моделировании. Основные подходы к построению математических моделей. Аналитический подход к моделированию. Экспериментальный подход к моделированию. Комбинированный подход к моделированию. Основные этапы построения математических моделей. Триединство процесса моделирования: модель, /Лек/	8	4	ПК-1.11-33 УК-9.2-У1 УК-9.2-В1	Л1.4 Л1.5 Э3 Э4			
1.2	Изучение математических моделей из биологии (модель хищник-жертва) и военного дела (модель танкового боя). /Ср/	8	15	ПК-1.2-31 ПК-1.2-32 ПК-1.2-33 ПК-1.2-У1	Л1.3 Э1 Э3 Э4			Р1
	Раздел 2. Аналитический подход							

2.1	<p>2.1 Понятие о физико-химическом моделировании. Основные сведения из курса "Физическая химия". Термодинамика химических превращений. Направление химических реакций. Уравнение изотермы химической реакции. Способы описания концентрации реагирующих веществ. Изменение энергии Гиббса в ходе реакции. Уравнение изотермы химической реакции в стандартных условиях. Связь между константами равновесия в зависимости от способа описания состава реакционной смеси. Гетерогенное химическое равновесие: запись констант равновесия. Определение констант равновесия при различных температурах. Понятие о линейной зависимости химических реакций. Метод Тёмкина-Шварцмана для расчёта констант равновесия. Расчёт константы равновесия на основе равновесных концентраций реагирующих веществ. Расчёт равновесных концентраций на основе константы равновесия. Методика расчёта равновесных концентраций при одновременном протекании нескольких реакций (методика моделирования равновесного состава раствора). Ограничения термодинамического подхода в случае моделирования (расчёта) равновесного состава /Лек/</p>	8	4	ПК-3.1-В1 УК-9.2-31 УК-9.2-32 УК-9.2-33 УК-9.2-У1	Л1.1 Э1 Э2 Э3 Э4			
2.2	<p>Представление алгоритма в виде блок-схем. Решение задач в табличном процессоре. /Пр/</p>	8	4	ПК-1.2-31 ПК-1.2-32 ПК-1.2-В1 ПК-1.2-В3	Л1.4 Э1 Э3 Э4			
2.3	<p>Численное решение нелинейных уравнений, полученных на основе протекающих химических реакций. /Пр/</p>	8	12	ПК-1.11-У3 ПК-1.11-В1 ПК-1.11-В2	Л1.4Л2.1 Э2 Э3 Э4			

2.4	Решение рассмотренных на практике задач с помощью встроенных функций пакетов прикладных программ. /Ср/	8	10	ПК-1.2-31 ПК-1.2-32 ПК-1.2-33 ПК-1.2-У1 ПК-1.2-У2 ПК-1.2-У3 ПК-1.2-В1 ПК-1.2-В2 ПК-1.2-В3	Л1.2 Э2 Э3 Э4			
2.5	2.2 Кинетические особенности протекания химических реакций. Методика составления систем уравнений, описывающих равновесные концентрации веществ, принимающих участие в химических реакциях. /Лек/	8	2	УК-9.2-32 УК-9.2-У1 УК-9.2-У2 УК-9.2-У3 УК-9.2-В1 УК-9.2-В2	Л1.3Л2.2 Э1 Э2 Э3 Э4			
2.6	Численное решение дифференциальных уравнений, полученных на основе уравнений формальной кинетики. /Пр/	8	6	ПК-1.2-32 ПК-1.11-У3 ПК-1.11-В1 ПК-1.11-В2 ПК-1.11-В3 УК-9.2-У2 УК-9.2-У3 УК-9.2-В1 УК-9.2-В2	Л1.4 Э3 Э4			P2
2.7	Решение рассмотренных на практике задач с помощью встроенных функций пакетов прикладных программ. /Ср/	8	10	ПК-1.2-31 ПК-1.2-32 ПК-1.2-33 ПК-1.2-У1 ПК-1.2-У2 ПК-1.2-У3	Э3 Э4		КМ1	
	Раздел 3. Экспериментальный подход							
3.1	3.1 Статистические методы анализа экспериментальных данных. Экспериментальные оценки истинного значения измеряемой случайной величины и её дисперсии. Определение грубых ошибок среди результатов повторностей опыта. Средневзвешенные оценки дисперсии. Анализ однородности исходных оценок дисперсии. Определение доверительной ошибки экспериментальной оценки измеряемого параметра. Определение числа повторностей опыта, обеспечивающего получение заданной доверительной ошибки оценки определяемого параметра. Проверка нормальности закона распределения. /Лек/	8	1	ПК-1.2-В1 ПК-1.2-В3 ПК-1.11-31 ПК-1.11-32 ПК-1.11-33 ПК-1.11-У2 ПК-3.1-У1 УК-9.2-В1	Л1.6Л3.2 Э3 Э4			
3.2	Первичная обработка экспериментальных данных. /Пр/	8	4	ПК-1.11-У1 ПК-1.11-У2 ПК-3.1-31 УК-9.2-В1	Л1.4 Л1.6 Э3 Э4		КМ3	

3.3	Первичная обработка данных в пакетах прикладных программ. /Ср/	8	2	ПК-1.2-31 ПК-1.2-У1 ПК-1.2-В1 ПК-1.2-В3	Э3 Э4			Р3
3.4	Планирование экспериментов в табличном процессоре. /Пр/	8	8	ПК-3.1-33 ПК-3.1-У2 ПК-3.1-У3 ПК-3.1-В1 ПК-3.1-В2 ПК-3.1-В3	Э3 Э4			Р3

3.5	<p>3.2 Планирование и обработка результатов однофакторного эксперимента. Формализация экспериментальных данных методом наименьших квадратов. Симметричный и равномерный план однофакторного эксперимента. Проверка адекватности полученного уравнения и его использование для оптимизации процесса. Получение экспоненциальной зависимости по результатам однофакторных экспериментов. Двухуровневые планы многофакторных экспериментов. Метод наименьших квадратов при обработке результатов многофакторного эксперимента. Двухуровневый план полного факторного эксперимента ПФЭ_{2n}. Уравнения, получаемые по результатам реализации планов ПФЭ_{2n}. Статистический анализ значимости оценок коэффициентов уравнения, его адекватности и работоспособности. Дробный факторный эксперимент ДФЭ_{2n-n'}. Планирование эксперимента при изменяющемся во времени влиянии на процесс неучтённых факторов. Использование планов ПФЭ_{2n} ДФЭ_{2n-n'} для получения уравнения процесса в виде экспоненциальной зависимости. Рассмотрение примеров. Многоуровневые многофакторные планы, использующие свойства латинских квадратов. Построение планов. Получение и использование для оптимизации уравнений различной структуры. /Лек/</p>	8	5	ПК-3.1-33 ПК-3.1-У2 ПК-3.1-У3 ПК-3.1-В1 ПК-3.1-В2 ПК-3.1-В3 УК-9.2-31	Л1.6Л2.3Л3.1 Л3.2 Л3.3 Э3 Э4			
3.6	<p>Изучение статей, посвящённых созданию моделей на основе планирования эксперимента. /Ср/</p>	8	10	УК-9.2-33	Л2.1Л3.2 Э1			

	Раздел 4. Комбинированный подход							
4.1	4.1 Особенности комбинированных математических моделей. Рассмотрение математических моделей из области профессиональной компетенции (прогнозирование показателей качества кокса М25 и М10). /Лек/	8	2	УК-9.2-31 УК-9.2-33 УК-9.2-В1	Л1.5 Л1.6 Э1 Э2 Э3 Э4			
4.2	Практическая реализация некоторых существующих математических моделей для прогнозирования показателей качества кокса в табличном процессоре. /Пр/	8	2	ПК-3.1-В1 ПК-3.1-В2 ПК-3.1-В3 УК-9.2-В3	Л1.6Л3.1 Э3 Э4			Р4
4.3	Изучение обзорных статей в области моделирования и прогнозирования показателей качества кокса. /Ср/	8	16	УК-9.2-33	Э1			
	Раздел 5. Зачёт с оценкой							
5.1	Зачёт с оценкой /Экзамен/	8	27	ПК-1.2-31 ПК-1.2-32 ПК-1.2-33 ПК-1.2-У1 ПК-1.2-У2 ПК-1.2-У3 ПК-1.2-В1 ПК-1.2-В2 ПК-1.2-В3 ПК-1.11-31 ПК-1.11-32 ПК-1.11-33 ПК-1.11-У1 ПК-1.11-У2 ПК-1.11-У3 ПК-1.11-В1 ПК-1.11-В2 ПК-1.11-В3 ПК-3.1-31 ПК-3.1-32 ПК-3.1-33 ПК-3.1-У1 ПК-3.1-У2 ПК-3.1-У3 ПК-3.1-В1 ПК-3.1-В2 ПК-3.1-В3 УК-9.2-31 УК-9.2-32 УК-9.2-33 УК-9.2-У1 УК-9.2-У2 УК-9.2-У3 УК-9.2-В1 УК-9.2-В2 УК-9.2-В3				