

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Котова Лариса Анатольевна  
Должность: Директор филиала  
Дата подписания: 08.01.2023 13:17:33  
Уникальный программный ключ:  
10730ffe6b1ed036b744b6a9d97700b86e5c04a7

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  
в том числе: Формы контроля в семестрах:  
зачет с оценкой 8  
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	90	90	90
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
<b>2.1</b>	<b>Требования к предварительной подготовке обучающегося:</b>	
2.1.1	Информатика	
2.1.2	Физика	
2.1.3	Химия	
2.1.4	Процессы и аппараты химической технологии	
2.1.5	Дополнительные главы физической химии	
2.1.6	Курсовая научно-исследовательская работа	
2.1.7	Решение прикладных задач с использованием MATLAB	
2.1.8	Химическая технология топлива и углеродных материалов	
2.1.9	Аналитическая химия и физико-химические методы анализа	
2.1.10	Массообменные процессы химической технологии	
2.1.11	Химия высокомолекулярных соединений	
2.1.12	Обогащение полезных ископаемых	
2.1.13	Технология и использование углеродных материалов	
2.1.14	Учебная практика по получению первичных профессиональных умений	
2.1.15	Физическая химия	
2.1.16	Начертательная геометрия и инженерная графика	
<b>2.2</b>	<b>Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:</b>	

**3. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ФОРМИРУЕМЫМИ КОМПЕТЕНЦИЯМИ**

<b>ПК-2: Способен выполнять отдельные этапы научно-исследовательских и экспериментальных работ в области химического производства, опираясь на последние достижения науки и способы цифровой трансформации производства</b>	
<b>Знать:</b>	
ПК-2-31	основные методы первичной обработки данных
ПК-2-33	основы системного подхода
ПК-2-32	основы регрессионного анализа
<b>ОПК-1: Способен изучать, анализировать, использовать механизмы химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире, основываясь на знании о строении вещества, природе химической связи и свойствах различных классов химических элементов, соединений, веществ и материалов, осуществлять моделирование, анализ и эксперименты в целях проведения детального исследования для решения задач в профессиональной области</b>	
<b>Знать:</b>	
ОПК-1-32	особенности физико-химического моделирования равновесного состава раствора
ОПК-1-31	основные подходы к построению математических моделей (аналитический, экспериментальный и комбинированный подходы)
ОПК-1-33	особенности моделирования скорости протекания химических реакций, основные модели в области профессиональной деятельности (коксохимия, прогноз качества кокса по показателям M25 и M10)
<b>ПК-2: Способен выполнять отдельные этапы научно-исследовательских и экспериментальных работ в области химического производства, опираясь на последние достижения науки и способы цифровой трансформации производства</b>	

<b>Уметь:</b>
ПК-2-У2 на основе статистических методов сопоставлять работу аналогичного оборудования (анализ однородности средних)
ПК-2-У1 проводить первичную обработку статистических данных
<b>ОПК-1: Способен изучать, анализировать, использовать механизмы химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире, основываясь на знании о строении вещества, природе химической связи и свойствах различных классов химических элементов, соединений, веществ и материалов, осуществлять моделирование, анализ и эксперименты в целях проведения детального исследования для решения задач в профессиональной области</b>
<b>Уметь:</b>
ОПК-1-У2 устанавливать линейную зависимость или независимость химических реакций
ОПК-1-У1 составлять примерные схемы происходящих химических реакций
ОПК-1-У3 сводить систему нелинейных уравнений к одному общему нелинейному
<b>ПК-2: Способен выполнять отдельные этапы научно-исследовательских и экспериментальных работ в области химического производства, опираясь на последние достижения науки и способы цифровой трансформации производства</b>
<b>Уметь:</b>
ПК-2-У3 учитывать слияние подсистем на общее поведение системы
<b>Владеть:</b>
ПК-2-В2 навыками численного решения нелинейных и дифференциальных уравнений в табличном процессоре
ПК-2-В3 навыками работы в специализированных пакетах прикладных программ
ПК-2-В1 навыками работы и представления экспериментальных данных в табличном процессоре
<b>ОПК-1: Способен изучать, анализировать, использовать механизмы химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире, основываясь на знании о строении вещества, природе химической связи и свойствах различных классов химических элементов, соединений, веществ и материалов, осуществлять моделирование, анализ и эксперименты в целях проведения детального исследования для решения задач в профессиональной области</b>
<b>Владеть:</b>
ОПК-1-В1 навыками применения справочной литературы
ОПК-1-В2 навыками расчёта недостающих термодинамических параметров (метод Тёмкина-Шварцмана)
ОПК-1-В3 приёмами поиска экстремума по уравнению модели

#### 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
	<b>Раздел 1. Общие вопросы моделирования</b>							

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	ОПК-1-31	Л1.4 Л1.5 Э3 Э4			
1.2	Изучение математических моделей из биологии (модель хищник-жертва) и военного дела (модель танкового боя). /Ср/	8	10	ОПК-1-31	Л1.3 Э1 Э3 Э4			
	<b>Раздел 2. Аналитический подход</b>							

2.1	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/	8	4	ОПК-1-32 ОПК-1-33 ОПК-1-У1 ОПК-1-У2	Л1.1 Э1 Э2 Э3 Э4			
2.2	Представление алгоритма в виде блок-схем. Решение задач в табличном процессоре. /Пр/	8	4	ОПК-1-В1 ОПК-1-В2 ОПК-1-У1	Л1.4 Э1 Э3 Э4			
2.3	Численное решение нелинейных уравнений, полученных на основе протекающих химических реакций. /Пр/	8	12	ПК-2-33 ПК-2-31 ПК-2-В2 ПК-2-В3	Л1.4Л2.1 Э2 Э3 Э4			
2.4	Решение рассмотренных на практике задач с помощью встроенных функций пакетов прикладных программ. /Ср/	8	10	ПК-2-В3 ПК-2-В1	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	ПК-2-В3 ПК-2-В2 ПК-2-В1	Л1.3Л2.2 Э1 Э2 Э3 Э4			
2.6	Численное решение дифференциальных уравнений, полученных на основе уравнений формальной кинетики. /Пр/	8	6	ПК-2-В3 ПК-2-В2 ПК-2-В1	Л1.4 Э3 Э4			
2.7	Решение рассмотренных на практике задач с помощью встроенных функций пакетов прикладных программ. /Ср/	8	10	ПК-2-В1 ПК-2-У2 ПК-2-У3	Э3 Э4			
	<b>Раздел 3. Экспериментальный подход</b>							
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	ОПК-1-33 ОПК-1-В1 ПК-2-31 ОПК-1-В3 ПК-2-32 ПК-2-33	Л1.6Л3.2 Э3 Э4			
3.2	Первичная обработка экспериментальных данных. /Пр/	8	4	ПК-2-В3 ПК-2-В2 ПК-2-В1 ПК-2-У1	Л1.4 Л1.6 Э3 Э4			
3.3	Первичная обработка данных в пакетах прикладных программ. /Ср/	8	2	ПК-2-В1 ПК-2-В2 ПК-2-В3 ПК-2-У1	Э3 Э4			
3.4	Планирование экспериментов в табличном процессоре. /Пр/	8	8	ПК-2-31 ПК-2-У2 ПК-2-У1 ПК-2-В1	Э3 Э4			

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<sub>2n</sub>. Уравнения, получаемые по результатам реализации планов ПФЭ<sub>2n</sub>. Статистический анализ значимости оценок коэффициентов уравнения, его адекватности и работоспособности. Дробный факторный эксперимент ДФЭ<sub>2n-n'</sub>. Планирование эксперимента при изменяющемся во времени влиянии на процесс неучтённых факторов. Использование планов ПФЭ<sub>2n</sub> ДФЭ<sub>2n-n'</sub> 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-2-У2 ПК-2-33 ПК-2-У3 ПК-2-В1	Л1.6Л2.3Л3.1 Л3.2 Л3.3 Э3 Э4			
-----	--	---	---	---------------------------------	------------------------------	--	--	--

3.6	Изучение статей, посвящённых созданию моделей на основе планирования эксперимента. /Ср/	8	10	ОПК-1-33 ПК-2-В3 ПК-2-В2 ПК-2-В1 ПК-2-У2 ПК-2-33	Л2.1Л3.2 Э1			
	<b>Раздел 4. Комбинированный подход</b>							
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	ОПК-1-33 ПК-2-В1 ПК-2-У3 ПК-2-У2 ПК-2-33	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	ОПК-1-33 ПК-2-В1	Л1.6Л3.1 Э3 Э4			
4.3	Изучение обзорных статей в области моделирования и прогнозирования показателей качества кокса. /Ср/	8	12	ОПК-1-33 ПК-2-31 ОПК-1-В1	Э1			
	<b>Раздел 5. Зачёт с оценкой</b>							
5.1	Зачёт с оценкой /Экзамен/	8	36					