

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Котова Лариса Анатольевна
Должность: Директор филиала
Дата подписания: 01.06.2026 19:40:11
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

Приложение 4

к ОПОП ВО 18.03.01 Химическая технология
Химическая технология природных энергоносителей и
углеродных материалов

Рабочая программа дисциплины

Моделирование химико-технологических процессов

Закреплена за подразделением	Кафедра математики и естествознания (Новотроицкий филиал)		
Направление подготовки	18.03.01 Химическая технология		
Образовательная программа	18.03.01 Химическая технология / Химическая технология природных энергоносителей и углеродных материалов		
Квалификация	Бакалавр		
Форма обучения	заочная		
Общая трудоемкость	4 ЗЕТ	Виды контроля на курсах:	
Часов по учебному плану	144	зачет с оценкой 5 контрольная работа 5	

Распределение часов дисциплины по курсам

Курс	5		Итого	
	уп	рп		
Лекции	12	12	12	12
Практические	12	12	12	12
Итого ауд.	24	24	24	24
Контактная работа	24	24	24	24
Сам. работа	116	116	116	116
В том числе сам. работа в рамках ФОС		36		
Часы на контроль	4	4	4	4
Итого	144	144	144	144

Программу составил(и):

к.т.н., Доцент, Алексеев Д.И.

Рабочая программа дисциплины

Моделирование химико-технологических процессов

Составлен на основании учебного плана:

18.03.01_24_ХимТехнология_ПрПЭиУМ_заоч.plx, утвержденного Ученым советом НИТУ МИСИС в составе соответствующей ОПОП ВО 18.03.01 Химическая технология Химическая технология природных энергоносителей и углеродных материалов протокол от 27.11.2025 №68.

Рабочая программа одобрена на заседании

Кафедра математики и естествознания (Новотроицкий филиал)

Протокол от 11.03.2026 г., №3.

Руководитель подразделения Швалёва Анна Викторовна.

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ

1.1	Цель: Изучить теоретические и практические основы моделирования химико-технологических процессов
1.2	Задачи:
1.3	- изучить основные методы построения, численного решения, реализации (представления) и исследования с помощью компьютерных программ математических моделей;
1.4	- освоить существующие основные математические модели, используемые при описании химико-технологических процессов;
1.5	- научить свободному чтению 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	Химия	
2.1.2	Информатика	
2.1.3	Учебная практика	
2.1.4	Химическая технология топлива и углеродных материалов	
2.1.5	Массообменные процессы химической технологии	
2.1.6	Аналитическая химия и физико-химические методы анализа	
2.1.7	Химическая технология полимерных соединений	
2.1.8	Физическая химия	
2.1.9	Начертательная геометрия и инженерная графика	
2.2	Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:	

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ФОРМИРУЕМЫМИ КОМПЕТЕНЦИЯМИ

ОПК-1: Способен изучать, анализировать, использовать механизмы химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире, основываясь на знаниях 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	
Знать:	
ОПК-1-31	природу химической связи и свойства различных классов химических элементов, соединений, веществ и материалов
ОПК-1-32	основные методы и средства проведения экспериментальных исследований и испытаний с учетом требований техники безопасности
ОПК-1-33	методологию научного эксперимента, основы обработки и обобщения экспериментальных данных в виде научных отчетов, докладов и презентаций
ПК-2: Способен выполнять теоретические расчеты и экспериментальные работы в области химического производства, опираясь на последние достижения науки с применением наилучших доступных цифровых технологий	
Знать:	
ПК-2-31	основные источники информации; классификационные библиографические системы
ПК-2-32	современные информационные технологии
ОПК-1: Способен изучать, анализировать, использовать механизмы химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире, основываясь на знаниях 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	
Уметь:	
ОПК-1-У1	анализировать основные механизмы химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире
ОПК-1-У2	выбирать способы и средства измерений и проводить экспериментальные исследования, испытания по заданной методике

ПК-2: Способен выполнять теоретические расчеты и экспериментальные работы в области химического производства, опираясь на последние достижения науки с применением наилучших доступных цифровых технологий
Уметь:
ПК-2-У1 грамотно обработать научно-техническую информацию по выбранной теме и оформить аналитический обзор
ПК-2-У2 проводить обработку информации с использованием прикладных программных средств сферы профессиональной деятельности
ОПК-1: Способен изучать, анализировать, использовать механизмы химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире, основываясь на знаниях 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
Владеть:
ОПК-1-В1 навыками анализа механизмов химических реакций, протекающих в технологических процессах
ОПК-1-В2 способами обработки и представления полученных данных и оценки погрешности результатов измерений
ПК-2: Способен выполнять теоретические расчеты и экспериментальные работы в области химического производства, опираясь на последние достижения науки с применением наилучших доступных цифровых технологий
Владеть:
ПК-2-В1 методами поиска, сбора и классификации научно-технической информации
ПК-2-В2 навыками пользователя сетевых компьютерных технологий и баз данных в своей профессиональной области

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	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/	5	2	ОПК-1-31 ОПК-1-33 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.2Л3. 2 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6			Р1
1.2	Изучение математических моделей из биологии (модель хищник-жертва) и военного дела (модель танкового боя /Ср/	5	5	ПК-2-31 ОПК-1-В2	Л1.4Л2.1Л3. 1 Э1 Э3			
	Раздел 2. Аналитический подход							

2.1	<p>Понятие о физикохимическом 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>	5	3	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В2	Л1.3Л2.1 Л2.2Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6			Р2
2.2	Представление алгоритма в виде блок-схем. Решение задач в табличном процессоре. /Пр/	5	1	ПК-2-31 ПК-2-У1 ОПК-1-В2	Л1.3Л2.1Л3.2 Э2			
2.3	Импульсная характеристика, способы получения в Matlab. Графический вывод. /Ср/	5	8	ПК-2-31 ОПК-1-33 ОПК-1-В2	Л1.3Л2.2Л3.2 Э1			
2.4	Решение рассмотренных на практике задач с помощью встроенных функций пакетов прикладных программ /Ср/	5	10	ОПК-1-33 ОПК-1-У1	Л1.4Л2.1Л3.2 Э1			

2.5	Кинетические особенности протекания химических реакций. Методика составления систем уравнений, описывающих равновесные концентрации веществ, принимающих участие в химических реакциях /Лек/	5	1	ОПК-1-31	Л1.3Л2.2Л3.1 Э1 Э4 Э6			
2.6	Численное решение дифференциальных уравнений, полученных на основе уравнений формальной кинетики /Пр/	5	2	ОПК-1-У2 ОПК-1-В1 ОПК-1-В2	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1Л3.2 Э1			
2.7	Решение рассмотренных на практике задач с помощью встроенных функций пакетов прикладных программ /Ср/	5	10	ПК-2-32 ОПК-1-33 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1Л3.2 Э2 Э3 Э6			Р2
Раздел 3. Экспериментальный подход								
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/	5	2	ОПК-1-У1	Л1.2 Л1.3Л2.2Л3.2 Э1 Э2 Э4 Э5			Р3
3.2	Первичная обработка экспериментальных данных /Пр/	5	2	ПК-2-32 ОПК-1-33 ОПК-1-В2	Л1.3Л2.1Л3.2 Э1 Э3 Э6	коучинг		
3.3	Первичная обработка данных в пакетах прикладных программ /Ср/	5	10	ОПК-1-31 ОПК-1-32 ОПК-1-33	Л1.3Л2.1Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6	виртуальный тьюториал		
3.4	Планирование экспериментов в табличном процессоре /Пр/	5	3	ОПК-1-У1 ОПК-1-У2 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1Л3.1 Л3.2 Э1 Э2			

3.5	<p>Планирование и обработка результатов однофакторного экспериментов. 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>	5	2	ПК-2-31 ПК-2-32 ОПК-1-В2	Л1.4Л2.1Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5 Э6			
-----	---	---	---	--------------------------	-------------------------------------	--	--	--

3.6	Изучение статей, посвящённых созданию моделей на основе планирования эксперимента /Ср/	5	12	ПК-2-У1 ПК-2-У2 ПК-2-В1 ПК-2-В2	Л1.3Л2.1Л3.2 Э1			Р4
	Раздел 4. Комбинированный подход							
4.1	Особенности комбинированных математических моделей. Рассмотрение математических моделей из области профессиональной компетенции (прогнозирование показателей качества кокса М25 и М10). /Лек/	5	2	ПК-2-У2 ПК-2-В1 ПК-2-В2	Л1.2 Л1.3Л2.2Л3.2 Э1 Э3 Э5			Р4
4.2	Практическая реализация некоторых существующих математических моделей для прогнозирования показателей качества кокса в табличном процессоре /Пр/	5	4	ОПК-1-31 ОПК-1-У1 ОПК-1-В2	Л1.2 Л1.3Л2.2Л3.2 Э2 Э5 Э6			
4.3	Изучение обзорных статей в области моделирования и прогнозирования показателей качества кокса /Ср/	5	25	ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-В1 ПК-2-В2 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1	Л1.1Л2.1Л3.2 Э1 Э2 Э5			Р5
	Раздел 5. Подготовка к контрольным мероприятиям и выполняемым работам							
5.1	Объем часов самостоятельной работы на подготовку к КМ /Ср/	5	26	ПК-2-У1 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3		КМ1,КМ2	
5.2	Объем часов самостоятельной работы на подготовку к ВР /Ср/	5	10	ПК-2-У1 ПК-2-В2 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1	Л1.1 Л1.2 Л1.4Л2.1 Л2.2Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э5 Э6		КМ3	

5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ

5.1. Контрольные мероприятия (контрольная работа, тест, коллоквиум, экзамен и т.п), вопросы для самостоятельной подготовки

Код КМ	Контрольное мероприятие	Проверяемые индикаторы компетенций	Вопросы для подготовки
--------	-------------------------	------------------------------------	------------------------

КМ1	Контрольная работа	ОПК-1-31;ОПК-1-32;ОПК-1-33;ОПК-1-У1;ОПК-1-У2;ОПК-1-В1;ОПК-1-В2;ПК-2-31;ПК-2-32;ПК-2-У1;ПК-2-У2;ПК-2-В1;ПК-2-В2	<p>Оценить с физико-химической точки зрения, при каком значении рН происходит переход $PbSO_4$ в $Pb(OH)_2$. Изменение рН происходит за счёт $NaOH$.</p> <p>В системе предполагается протекание следующих химических реакций:</p> <p>Уравнение материального баланса:</p> <p>Уравнение электронейтральности:</p> <p>Примечание: при решении задачи необходимо по имеющимся уравнениям составить систему нелинейных уравнений, из неё вывести уравнение: Из справочных данных необходимо определить константы химических реакций $K_1 - K_6$ соответствующих реакций (1)-(6).</p> <p>Из практических соображений установить, с какой точностью необходимо вычислять значение рН. Нелинейное уравнение необходимо решить четырьмя методами: графическим, половинного деления, Ньютона, хорд. Сделать вывод о скорости сходимости каждого из методов при заданной точности получаемого результата, а также пригодности для решения задачи физико-химического моделирования. Рассмотреть эвристический метод, основанный на специфике решаемой задачи, решения системы нелинейных уравнений. Все вычисления произвести в табличном процессоре.</p>
-----	--------------------	--	--

КМ2	Вопросы к зачёту с оценкой (проводится устно)	ОПК-1-31;ОПК-1-32;ОПК-1-33;ОПК-1-У1;ОПК-1-У2;ОПК-1-В1;ОПК-1-В2;ПК-2-31;ПК-2-32;ПК-2-У1;ПК-2-У2;ПК-2-В1;ПК-2-В2	<p>Общие вопросы моделирования:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Общее представление о модели. Математические модели: определение, достоинства и недостатки, по сравнению с другими формами представления модели. Понятие «моделирование». Классификация математических моделей; 2. Сущность аналитического подхода к математическому моделированию. Моделирование ХТП при аналитическом подходе; 3. Сущность экспериментального подхода к математическому моделированию; 4. Сущность комбинированного подхода к математическому моделированию; 5. Триединство при описании объекта моделирования. Требования к каждой из составной части при описании объекта; 6. Основные этапы моделирования (с поясняющими примерами). Аналитический подход к созданию математических моделей; 7. Уравнение изотермы химической реакции при различном способе выражения концентрации. Выражение уравнения изотермы химической реакции в стандартных условиях. Связь между константами равновесия в зависимости от способа описания состава реакционной смеси. Соотношения для констант равновесия K_N, K_m, K_c в идеальном растворе; 8. Метод Тёмкина-Шварцмана расчёта констант равновесия химической реакции. Понятие о линейной зависимости и независимости уравнений химических реакций. Основные способы определения линейно независимых уравнений химических реакций; 9. Возможности моделирования при термодинамическом подходе к определению равновесных значений участвующих в химических реакциях веществ. Основные достоинства и недостатки при термодинамическом подходе. 10. Основные понятия и определения формальной кинетики: скорость химической реакции, способы её выражения, молекулярность реакции, порядок реакции, частный порядок реакции, постулат химической кинетики (уравнение Гульдберга и Вааге), константа скорости химической реакции (правило ВантГоффа, уравнение Аррениуса); 11. Скорость необратимых реакций первого, второго, n-ого порядков. Обратимая реакция первого порядка; 12. Обратимая реакция второго порядка (разобрать только частный случай: отсутствие в начальный момент времени продуктов реакции, начальные концентрации реагирующих веществ равны между собой). Параллельные реакции; 13. Последовательные реакции первого порядка (для трёх химических соединений). Разобрать различные случаи соотношения между собой констант химических реакций; 14. Общее уравнение динамики и скорости химической реакции, протекающей в потоке в режиме идеального вытеснения. Необратимая реакция первого и второго порядков, протекающих в потоке в режиме идеального вытеснения. 15. Обратимая реакция первого и второго порядков, протекающих в потоке в режиме идеального вытеснения. Последовательная реакция первого порядка, протекающая в потоке в режиме идеального вытеснения. 16. Кинетика гомогенных реакций, протекающих в режиме идеального перемешивания. Экспериментальный подход к созданию математических моделей; 17. Статистические методы анализа экспериментальных данных: оценка истинного значения измеряемой величины и её дисперсии; определение грубых ошибок; средневзвешенные оценки дисперсии; анализ однородности исходных оценок дисперсии. 18. Определение доверительной ошибки экспериментальной оценки измеряемого параметра. Определение числа повторностей опыта, обеспечивающего получение заданной доверительной ошибки оценки определяемого параметра. Проверка нормальности закона распределения. 19. Метод наименьших квадратов. Сущность планирования эксперимента в сравнении с непосредственным применением метода наименьших квадратов. Симметричный и равномерный
-----	---	--	--

			<p>план однофакторного эксперимента Проверка адекватности полученного уравнения и его использование для оптимизации процесса. Получение экспоненциальной зависимости по результатам однофакторных экспериментов.</p> <p>20. Метод наименьших квадратов при обработке результатов многофакторного эксперимента. Двухуровневый план полного факторного эксперимента ПФЭ2n. Уравнения, получаемые по результатам реализации планов ПФЭ2n. Статистический анализ значимости оценок коэффициентов уравнения, его адекватности и работоспособности.</p> <p>21. Дробный факторный эксперимент ДФЭ2n-n'. Планирование эксперимента при изменяющемся во времени влиянии на процесс неучтённых факторов. Использование планов ПФЭ2n ДФЭ2n-n' для получения уравнения процесса в виде экспоненциальной зависимости.</p> <p>22. Многоуровневые многофакторные планы, использующие свойства латинских квадратов. Построение планов. Получение и использование для оптимизации уравнений различной структуры.</p> <p>23. Применение методов приближённых вычислений при обработке результатов экспериментов. Оценки точности измерений и приближённых вычислений. Оценка точности окончательного результата. Практическое вычисление ошибок. Численные методы решения задач, возникающих при моделировании:</p> <p>24. Решение нелинейного уравнения методом деления отрезка пополам;</p> <p>25. Решение нелинейного уравнения методом Ньютона;</p> <p>26. Решение нелинейного уравнения методом хорд;</p> <p>27. Решение дифференциального уравнения методом Эйлера. Модифицированный метод Эйлера. Адаптация метода Эйлера на случай систем дифференциальных уравнений. Особенности решения систем дифференциальных уравнений при моделировании ХТП;</p> <p>28. Решение дифференциального уравнения методом Рунге-Куты четвёртого порядка. Адаптация метода Рунге-Куты на случай систем дифференциальных уравнений. Особенности решения систем дифференциальных уравнений при</p>
КМЗ	Темы рефератов	ПК-2-У1;ПК-2-У2;ОПК-1-У2	<p>Примерные темы рефератов:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) Прогнозирование показателей качества кокса М25 и М10; 2) Прогнозирование показателей качества кокса CRI, CSR; 3) Прогнозирование показателей качества смолы коксования; 4) Оптимизация состава угольной шихты для коксования; 5) Прогнозирование выхода летучих веществ из шихты на основе исходных углей; 6) Аддитивность показателей качества угольной шихты; 7) Моделирование температурного профиля коксового пирога по ширине камеры коксования.
5.2. Перечень работ, выполняемых по дисциплине (Курсовая работа, Курсовой проект, РГР, Реферат, ЛР, ПР и т.п.)			
Код работы	Название работы	Проверяемые индикаторы компетенций	Содержание работы
P1	Аудиторные работы Общие вопросы моделирования	ОПК-1-31;ОПК-1-32;ОПК-1-33	<p>Аудиторные работы. Блок № (БЛ): БЛ №1 «Общие вопросы моделирования»</p> <p>№1. Составить блок-схему для вычисления суммы квадратов первых N чисел натурального ряда.</p> <p>№2. Составить блок-схему для решения задачи. Каково время падения тела, если известны высота, ускорение, начальная скорость. Примечание: предусмотреть корректную обработку всех возможных случаев: решение не имеет корней; один, два корня; задача не имеет физического смысла.</p>

P2	Аудиторные работы Аналитический подход	ОПК-1-У1;ОПК-1-В1;ОПК-1-В2;ОПК-1-У2	<p>БЛ №2 «Аналитический подход к моделированию ХТП» №1. Рассчитать ионно-молекулярный состав в присутствии KCN, растворённого в количестве $C=10^{-5}$ моль / л. Задаться значениями pH в интервале 0-14 и численно рассчитать ионно-молекулярный состав данной системы. Результаты представить графически в информативном виде (использовать логарифмическую шкалу выходного параметра). Все расчёты произвести в табличном процессоре.</p> <p>№2. Рассчитать ионно-молекулярный состав раствора в присутствии растворённой углекислоты воздуха. Задаться значениями pH в интервале 0-14 и численно рассчитать ионно-молекулярный состав данной системы. Результаты представить графически в информативном виде (использовать логарифмическую шкалу выходного параметра). Все расчёты произвести в табличном процессоре.</p> <p>№3. Значение pH раствора регулируется изменением концентрации соды. Рассчитать концентрацию $[CO_3^{2-}]$ ионов в растворе, с учётом растворённой углекислоты воздуха. Задаться значениями pH в интервале 0-14 и численно рассчитать ионно-молекулярный состав данной системы. Результаты представить графически в информативном виде (использовать логарифмическую шкалу выходного параметра). Все расчёты произвести в табличном процессоре.</p> <p>№4. При каком значении pH достигается практически полное осаждение MnS ($PPMnS = 2.5 \cdot 10^{-10}$), содержащегося в растворе в количестве 0,005 моль, при употреблении 50 % избытка осадителя. Расчёт произвести на 1 л исследуемого раствора. Все численные расчёты произвести в табличном процессоре, аналитические записи предоставить в бумажном виде. Из каких соображений находится концентрация марганца $[Mn^{2+}]$, и между какими химическими формами осуществляется материальный баланс по сере избыточной концентрации осадителя?</p> <p>№5. Пример 5. Рассчитать равновесный состав газовой фазы для установившегося термодинамического равновесия получения водяного газа по реакциям: В данном задании достаточно ограничиться выводом кубического уравнения относительно pCO.</p> <p>№6. Оценить с физико-химической точки зрения, при каком значении pH происходит переход $PbSO_4$ в $Pb(OH)_2$. Изменение pH происходит за счёт NaOH. В системе предполагается протекание следующих химических реакций: Уравнение материального баланса: Уравнение электронейтральности: Примечание: при решении задачи необходимо по имеющимся уравнениям составить систему нелинейных уравнений, из неё вывести уравнение: Из справочных данных необходимо определить константы химических реакций $K_1 - K_6$ соответствующих реакций (1)-(6). Из практических соображений установить, с какой точностью необходимо вычислять значение pH. Нелинейное уравнение необходимо решить четырьмя методами: графическим, половинного деления, Ньютона, хорд. Сделать вывод о быстроте сходимости каждого из методов при заданной точности получаемого результата, а также пригодности для решения задачи физико-химического моделирования. Рассмотреть эвристический метод, основанный на специфике решаемой задачи, решения системы нелинейных уравнений. Все вычисления произвести в табличном процессоре.</p> <p>№7. Пользуясь результатами задачи №6 исключить из системы нелинейных уравнений уравнение (3). Решить полученную систему уравнений эвристическим методом. Сделать вывод о влиянии уравнения (3) на моделируемую систему и итоговое значение pH.</p> <p>№8. Пользуясь результатами задачи №6 исключить из системы нелинейных уравнений уравнение (3) и (5). Решить полученную систему уравнений эвристическим методом. Сделать вывод о влиянии уравнения (3) и (5) на моделируемую систему и итоговое значение pH.</p> <p>№9. Пользуясь результатами задачи №6 исключить из системы нелинейных уравнений уравнение (1), (3), (5). Решить полученную</p>
----	---	-------------------------------------	--

			<p>систему уравнений эвристическим методом. Сделать вывод о влиянии уравнения (1) на моделируемую систему и итоговое значение рН.</p> <p>№10. Решить нелинейное уравнение из задачи (6) с помощью встроенных функций специализированной программы MathCad. Сравнить полученное значение с уже полученными.</p> <p>№11. Решить систему нелинейных уравнений из задачи (6) с помощью встроенных функций специализированной программы MathCad. Сравнить полученное значение с уже полученными.</p> <p>№12. Исходя из понятия линейная зависимость/независимость химических реакций, с помощью встроенных математических функций MathCad для системы реакций</p> <p>Определить количество линейно-независимых химических реакций. Что это означает с точки зрения математического описания данной системы реакций.</p> <p>№13. Для необратимой реакции первого порядка: Составить дифференциальное уравнение скорости изменения концентрации А. Решить полученное дифференциальное уравнение методом Эйлера, модифицированным методом Эйлера, Рунге-Кутта. Сделать вывод о точности каждого из методов в сравнении друг с другом. Для расчёта принять следующие значения неизвестных параметров: $C_{0A} = 0,7$ моль/л; $k_1 = 0,001$ 1/с; $h = 0,1$ (шаг интегрирования).</p> <p>№14. Для последовательной схемы необратимых химических реакций первого порядка: А</p> <p>Составить систему дифференциальных уравнений и решить её с помощью метода Эйлера, модифицированного Эйлера, РунгеКутта 4-ого порядка. Сделать вывод о точности получаемого решения, сравнивая методы между собой. Для расчёта принять следующие значения неизвестных параметров: $C_{0A} = 0,5$ моль/л; $C_{0B} = C_{0C} = 0$ моль/л; $k_1 = 0,05$ 1/с; $k_2 = 0,07$ 1/с; $h = 0,1$ (шаг интегрирования).</p>
--	--	--	--

Р3	Аудиторные работы Экспериментальный подход	ПК-2-31;ПК-2-32;ПК-2-У1;ПК-2-У2	<p>БЛ №3 «Экспериментальный подход» №15. С надёжностью $P = 0,95$ обеспечить однородность представленных в таблице данных, исключив грубые ошибки.</p> <p>Решение данной задачи осуществить на основе двух методов: правила 2σ и критерия максимального отклонения g. Расчёты выполнить с использованием табличного процессора.</p> <p>№16. С помощью анализа однородности средних. Дать заключение о возможности преимущества ($P = 0,95$) одного аппарата перед другим по производительности.</p> <p>Расчёты выполнить с использованием табличного процессора.</p> <p>№17. Для проверки правильности вольтамперометрической (ВА) методики определения кадмия Cd использовали атомноабсорбционную (АА) методику, не содержащую систематической погрешности. При анализе одного и того же объекта получены следующие результаты (нг / мл Cd): ВА : 20,5; 22,4; 23,4; 20,8 АА: 23,5; 20,1; 19,9; 19,2; 19,0; 22,8</p> <p>Содержит ли вольтамперометрическая методика систематическую погрешность?</p> <p>Расчёты выполнить с использованием табличного процессора без использования специальной надстройки.</p> <p>№18. Решить задачу №17 используя надстройку табличного процессора.</p> <p>№19. Используя три различных генерирующих соотношения, составить планы экспериментов ДФЭ25-2. Записать формулы для расчёта коэффициентов линейной модели.</p> <p>№20. На основе латинских квадратов составить пятиуровневый план пятифакторного эксперимента для исследования процесса инфракрасной сушки гранулированных материалов в вакууме при импульсном энергоподводе. Получить математическую в виде суммы нелинейных функций и найти оптимальные значения режимных параметров процесса: плотности теплового потока на поверхности слоя материала CI (Вт/см²), толщина слоя продукта $СИ$ (мм), диаметра гранул $СIII$ (мм), величины разряжения $СIV$ (мм. рт.ст.) и скважности импульса CV (%), отношение времени работы инфракрасной сушилки к общему времени пребывания в сушильной камере). Выходом процесса y (руб/т) или критерием оптимальности принята величина приведённых доходов с учётом производительности установки и потребляемой мощности.</p>
Р4	Аудиторные работы Комбинированный подход	ПК-2-31;ПК-2-32;ПК-2-У1;ПК-2-У2	<p>БЛ №4 «Комбинированный подход» № 21. По данным работы [Кокс и химия. 1978. № 8. С.12–14] на основе ПФЭ 24 рассчитать значения коэффициентов линейной модели для прогнозирования показателей качества кокса М25 и М10, сравнить их с предложенными в самой научной статье.</p> <p>Указание к выполнению задания: на листе ТП в информативном виде создать таблицу планирования эксперимента ПФЭ 24, ввести средние значения показателей качества кокса М25 и М10 и рассчитать коэффициенты линейной модели.</p>

Р5	Дополнительные темы для практических занятий	ПК-2-31;ПК-2-32;ПК-2-У1;ПК-2-У2;ПК-2-В1;ПК-2-В2	1) Алгоритм решения нелинейного уравнения методом хорд; 2) Алгоритм решения нелинейного уравнения методом Ньютона; 3) Алгоритм решения нелинейного уравнения методом деления отрезка пополам. 4) Использование пакета прикладных программ MathCad для решения нелинейных уравнений; 5) Алгоритм решения дифференциальных уравнений методом Эйлера. 6) Алгоритм решения дифференциальных уравнений модифицированным методом Эйлера. 7) Алгоритм решения дифференциальных уравнений методом Рунге-Куты четвёртого порядка. 8) Использование пакета прикладных программ MathCad для решения дифференциальных уравнений; 9) Решение систем дифференциальных уравнений методом Эйлера, модифицированным методом Эйлера, Рунге-Куты. 10) Использование пакета прикладных программ MathCad для решения систем дифференциальных уравнений. 11) Практический анализ существующих моделей в области профессиональной компетенции (прогнозирование показателей качества кокса М25 и М10) в пакете MathCad. 12) Использование встроенной надстройки табличного процессора для решения задач математического программирования. 13) Использование программы MathCad для решения задач
----	--	---	---

5.3. Оценочные материалы, используемые для экзамена (билеты, тесты и т.п.)

Формой промежуточной аттестации по дисциплине является экзамен.
 Ниже представлен образец билета для экзамена, проводимого в устной форме.

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
 ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО АВТОНОМНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО
 ОБРАЗОВАНИЯ

«Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»

Новотроицкий филиал
 (НФ НИТУ «МИСИС»)

Кафедра Математики и естествознания

БИЛЕТ № 0

Дисциплина: «Моделирование химико-технологических процессов»

Направление: 18.03.01 «Химическая технология»

Форма обучения: очная

Форма проведения экзамена: устная

1. Общее представление о модели. Математические модели: определение; достоинства и недостатки, по сравнению с другими формами представления модели. Понятие «моделирование». Классификация математических моделей;

2. Решение нелинейного уравнения методом деления отрезка пополам.

Задача. В двух лабораториях при определении кремния в биологическом материале дифференциальноспектрофотметрическим методом получили следующие результаты (%):

I – 0,84; 0,95; 0,91; 0,91

II – 0,90; 0,82; 0,96; 0,91; 0,81

Существует ли значимое расхождение между результатами двух лабораторий? Если нет, объедините данные в одну выборку, рассчитайте среднее и доверительный интервал ($P = 0,95$). Если да, проведите расчёты для каждой лаборатории в отдельности.

Составил: к.т.н., доцент кафедры МиЕ Д.И. Алексеев

Зав. кафедрой МиЕ А.В. Швалёва

5.4. Методика оценки освоения дисциплины (модуля, практики. НИР)

Критерии оценивания реферата:

Подготовленный и оформленный в соответствии с требованиями письменный ответ или отчет оценивается преподавателем по следующим критериям:

- культура письменного изложения материала (логичность подачи материала, грамотность автора)
 - культура оформления материалов работы;
 - знания и умения на уровне требований стандарта данной дисциплины: знание фактического материала, усвоение общих понятий и идей;
 - степень обоснованности аргументов и обобщений (полнота, глубина, всесторонность раскрытия темы, корректность аргументации и системы доказательств, характер и достоверность примеров, иллюстративного материала, наличие знаний интегрированного характера, способность к обобщению);
- Объективность оценки работы преподавателем заключается в определении ее положительных и отрицательных сторон, по совокупности которых он окончательно оценивает представленную работу. При положительном заключении работа оценивается по системе зачтено/не зачтено.

Критерии оценки ответов на экзамене, проводимом в устной форме

- оценка «отлично» выставляется студенту, если четко сформулирован ответ на вопрос билета, ясно излагаются основные понятия и теоретические основы; логически соединены в единое повествование термины, понятия, теоретические обобщения, относящиеся к раскрываемой теме; если без ошибок выполнено практическое задание;
- оценка «хорошо» выставляется студенту, если частично сформулирован ответ на вопрос билета, излагаются основные понятия и теоретические основы; недостаточно логично соединены в единое повествование термины, понятия, теоретические обобщения, относящиеся к раскрываемой теме; если без ошибок выполнено практическое задание;
- оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если отсутствует четко сформулированный ответ на поставленный вопрос и ясное изложение темы; отсутствует логическое соединение в единое повествование теоретические обобщения; ответ формулируется на примерах бытового уровня; практическое задание выполнено с недочетами.

Критерии оценки ответов на экзамене, проводимом в дистанционной форме в LMS Moodle

90 ≤ Процент верных ответов ≤ 100 - отлично

75 ≤ Процент верных ответов < 90 - хорошо

60 ≤ Процент верных ответов < 75 – удовлетворительно

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ**6.1. Рекомендуемая литература****6.1.1. Основная литература**

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л1.1	Самойлов Н.А.	Примеры и задачи по курсу Математическое моделирование химико - технологических процессов. : Учебное пособие		СПб ЛАНЬ, , 2013г
Л1.2	Гумеров А.М.	Математическое моделирование химико – технологических процессов		СПб ЛАНЬ, 2014
Л1.3	А.В. Клинов, А.Г. Мухаметзянова	Математическое моделирование химико-технологических процессов : учебное пособие		Казань : Казанский государственный технологический университет, 2009
Л1.4	А.В. Клинов, А.В. Малыгин	Лабораторный практикум по математическому моделированию химико-технологических процессов : учебное пособие		Казань : КГТУ, 2011

6.1.2. Дополнительная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л2.1	А.Г.Дьячко	Математическое и имитационное моделирование производственных систем: монография		Москва: МИСиС, 2007
Л2.2	Касаткин, А.Г.	Основные процессы и аппараты химической технологии		М. : Гос. научно-техническое изд-во хим. лит., , 1961

6.1.3. Методические разработки

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
ЛЗ.1	Соловьев В.П., Богатов Е.М.	Организация эксперимента: учебное пособие		ТНТ, 2016
ЛЗ.2	Саблин А.В.	Моделирование химико- технологических процессов: учебное пособие		НФ НИТУ МИСиС, 2016

6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

Э1	учебно-методический сайт о моделировании и исследовании систем, объектов, технических процессов и физических явлений.	model.exponenta.ru
Э2	Статьи о возможностях ПК «МВТУ», опубликованные на сайте model.exponenta.ru: «Программный комплекс "Моделирование в технических устройствах"».	mvtu.power.bmstu.ru
Э3	LMS Moodle	https://newlms.misis.ru/login/index.php?loginredirect=1
Э4	Российская научная электронная библиотека	https://elibrary.ru/
Э5	КиберЛенинка	https://cyberleninka.ru/?from
Э6	НФ НИТУ "МИСИС"	https://nf.misis.ru/

6.3 Перечень программного обеспечения

П.1	WinPro 10 RUSUpgrdOLVNLEachAcdmcAP
П.2	Microsoft Office Professional Plus 2013 Russian OLP NL AcademicEdition;
П.3	Microsoft Office 2007 Russian Academic OPEN No Level
П.4	Microsoft Office Standard 2007 Russian OpenLicensePack NoLevel Acdmc
П.5	Microsoft Office 2010 Russian Academic OPEN 1 License No Level

6.4. Перечень информационных справочных систем и профессиональных баз данных

И.1	model.exponenta.ru - – учебно-методический сайт о моделировании и исследовании систем, объектов, технических процессов и физических явлений.
И.2	mvtu.power.bmstu.ru - Статьи о возможностях ПК «МВТУ», опубликованные на сайте model.exponenta.ru: «Программный комплекс "Моделирование в технических устройствах"».
И.3	xumuk.ru

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Ауд.	Назначение	Вид	Оснащение
114	Учебная аудитория для занятий лекционного типа, практических занятий	Лек	1 шт. - Компьютер в сборе; 1 шт. - Проектор Acer X118 DLP 3600Lm; 1 шт. - Экран Lumien Eco Picture 200x200 см; 19 шт. - Рулонные шторы; 4 шт. - Шкаф книжный; 26 шт. - Стол студенческий; 46 шт. - Стул; 1 шт. - Стол преподавательский.
123	Учебная лаборатория (компьютерный класс) Кабинет курсового и дипломного проектирования, самостоятельной работы обучающихся		14 шт. - Системный блок; 14 шт. - Монитор LCD LG21,5; 1 шт. - Экран настенный 200x200; 1 шт. - Проектор ACER X118DLP 3600; 1 шт. - Подвес для проектора; 1 шт. - Коммутатор D-Link; 1 шт. - Доска ученическая; 27 шт. - Столы ученические; 52 шт. - Стулья; 4 шт. - Жалюзи.

127	Учебная лаборатория (компьютерный класс)	1 шт. - Интерактивная доска Panasonic; 1 шт. - Проектор Epson; 1 шт. - Документ- камера Avermedia; 1 шт. - Хаб ACORP 16 порт; 12 шт. - Компьютер в сборе; 1 шт. - Системный блок NORBELis; 1 шт. - Монитор LCD Acer; 12 шт. - Компьютерные столы; 8 шт. - Ученический стол; 12 шт. - Кресло компьютерное; 16 шт. - Стулья; 1 шт. - Книжный шкаф; 1 шт. - Ученическая доска.
-----	--	---

8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Подготовка к промежуточной аттестации по дисциплине заключается в изучении теоретического материала по конспектам лекций, источникам основной и дополнительной литературы, включая темы самостоятельного изучения, ориентируясь на список контрольных вопросов по соответствующим темам.

При самостоятельном изучении материала рекомендуется заносить в тетрадь основные понятия, термины, формулировки законов, формулы и уравнения, выводы по изучаемой теме. Изучение любого вопроса необходимо проводить на уровне сущности, а не на уровне отдельных явлений. Это способствует более глубокому и прочному усвоению материала.

В случае затруднения при изучении дисциплины следует обращаться за консультацией к преподавателю. Все лекционные материалы, а также практические задания приведены в LMS Moodle.

Проведение экзамена:

Экзамен по данной дисциплине проводится в устной форме по экзаменационным билетам, каждый из которых включает 2 теоретических вопроса и одно практическое задание.

Показатели и критерии оценивания экзамена:

– на оценку «отлично» (5 баллов) – обучающийся демонстрирует высокий уровень освоения компетенций, всестороннее, систематическое и глубокое знание учебного материала, свободно выполняет практические задания, свободно оперирует знаниями, умениями, применяет их в ситуациях повышенной сложности.

– на оценку «хорошо» (4 балла) – обучающийся демонстрирует средний уровень освоения компетенций: основные знания, умения освоены, но допускаются незначительные ошибки, неточности, затруднения при аналитических операциях, переносе знаний и умений на новые, нестандартные ситуации.

– на оценку «удовлетворительно» (3 балла) – обучающийся демонстрирует пороговый уровень освоения компетенций: в ходе контрольных мероприятий допускаются ошибки, проявляется отсутствие отдельных знаний, умений, навыков, обучающийся испытывает значительные затруднения при оперировании знаниями и умениями при их переносе на новые ситуации.

– на оценку «неудовлетворительно» (2 балла) – обучающийся демонстрирует знания не более 20% теоретического материала, допускает существенные ошибки, не может показать интеллектуальные навыки решения простых задач.

– на оценку «неудовлетворительно» (1 балл) – обучающийся не может показать знания на уровне воспроизведения и объяснения информации, не может показать интеллектуальные навыки решения простых задач.