

Документ подписан простой электронной подписью
 Информация о владельце:
 ФИО: Котова Лариса Анатольевна
 Должность: Директор филиала
 Дата подписания: 21.08.2025 15:06:34
 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**

Рабочая программа дисциплины (модуля) **Моделирование химико-технологических процессов**

Закреплена за подразделением Кафедра математики и естествознания (Новотроицкий филиал)

Направление подготовки 18.03.01 Химическая технология

Профиль Химическая технология природных энергоносителей и углеродных материалов

Квалификация **Бакалавр**
 Форма обучения **заочная**
 Общая трудоемкость **4 ЗЕТ**

Часов по учебному плану	144	Формы контроля на курсах: экзамен 5
в том числе:		
аудиторные занятия	24	
самостоятельная работа	111	
часов на контроль	9	

Распределение часов дисциплины по курсам

Курс	5		Итого	
	уп	рп		
Вид занятий				
Лекции	12	12	12	12
Практические	12	12	12	12
Итого ауд.	24	24	24	24
Контактная работа	24	24	24	24
Сам. работа	111	111	111	111
В том числе сам. работа в рамках ФОС				
Часы на контроль	9	9	9	9
Итого	144	144	144	144

Программу составил(и):

к.т.н., Доцент, Алексеев Д.И.

Рабочая программа

Моделирование химико-технологических процессов

Разработана в соответствии с ОС ВО:

Федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования - бакалавриат по направлению подготовки 18.03.01 Химическая технология (приказ Минобрнауки России от 02.04.2021 г. № 119о.в.)

Составлена на основании учебного плана:

18.03.01 Химическая технология, 18.03.01_23_ХимТехнология_ПрПЭиУМ_заоч.plx Химическая технология природных энергоносителей и углеродных материалов, утвержденного Ученым советом ФГАОУ ВО НИТУ "МИСиС" в составе соответствующей ОПОП ВО 30.11.2021, протокол № 41

Утверждена в составе ОПОП ВО:

18.03.01 Химическая технология, Химическая технология природных энергоносителей и углеродных материалов, утвержденной Ученым советом ФГАОУ ВО НИТУ "МИСиС" 30.11.2021, протокол № 41

Рабочая программа одобрена на заседании

Кафедра математики и естествознания (Новотроицкий филиал)

Протокол от 12.03.2025 г., №3

Руководитель подразделения к.п.н., доцент Швалева А.В.

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	Массообменные процессы химической технологии	
2.1.2	Обогащение полезных ископаемых	
2.1.3	Химическая технология топлива и углеродных материалов	
2.1.4	Аналитическая химия и физико-химические методы анализа	
2.1.5	Технология и использование углеродных материалов	
2.1.6	Химия высокомолекулярных соединений	
2.1.7	Начертательная геометрия и инженерная графика	
2.1.8	Учебная практика	
2.1.9	Физическая химия	
2.1.10	Информатика	
2.1.11	Химия	
2.1.12	Физика	
2.1.13	Процессы и аппараты химической технологии	
2.1.14	Дополнительные главы физической химии	
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 основные подходы к построению математических моделей (аналитический, экспериментальный и комбинированный подходы)

ОПК-1-32 особенности физико-химического моделирования равновесного состава раствора

ОПК-1-33 особенности моделирования скорости протекания химических реакций, основные модели в области профессиональной деятельности (коксохимия, прогноз качества кокса по показателям M25 и M10)

ПК-2: Способен выполнять отдельные этапы научно-исследовательских и экспериментальных работ в области химического производства, опираясь на последние достижения науки и цифровую трансформацию производства

Знать:

ПК-2-31 основные методы первичной обработки данных

ПК-2-32 основы регрессионного анализа

ПК-2-33 основы системного подхода

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 составлять примерные схемы происходящих химических реакций

ОПК-1-У2 устанавливать линейную зависимость или независимость химических реакций
ОПК-1-У3 сводить систему нелинейных уравнений к одному общему нелинейному
ПК-2: Способен выполнять отдельные этапы научно-исследовательских и экспериментальных работ в области химического производства, опираясь на последние достижения науки и цифровую трансформацию производства
Уметь:
ПК-2-У3 учитывать слияние подсистем на общее поведение системы
ПК-2-У2 на основе статистических методов сопоставлять работу аналогичного оборудования (анализ однородности средних)
ПК-2-У1 проводить первичную обработку статистических данных
Владеть:
ПК-2-В1 навыками работы и представления экспериментальных данных в табличном процессоре
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-В3 приёмами поиска экстремума по уравнению модели
ОПК-1-В2 навыками расчёта недостающих термодинамических параметров (метод Тёмкина-Шварцмана)
ОПК-1-В1 навыками применения справочной литературы
ПК-2: Способен выполнять отдельные этапы научно-исследовательских и экспериментальных работ в области химического производства, опираясь на последние достижения науки и цифровую трансформацию производства
Владеть:
ПК-2-В2 навыками численного решения нелинейных и дифференциальных уравнений в табличном процессоре
ПК-2-В3 навыками работы в специализированных пакетах прикладных программ

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/	5	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/	5	20	ОПК-1-31	Л1.3 Э1 Э3 Э4			

	Раздел 2. Аналитический подход							
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/	5	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/	5	1	ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-1-В2	Л1.4 Э1 Э3 Э4			
2.3	Численное решение нелинейных уравнений, полученных на основе протекающих химических реакций. /Ср/	5	11	ПК-2-31 ПК-2-33 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/	5	10	ПК-2-В1 ПК-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/	5	1	ПК-2-В1 ПК-2-В2 ПК-2-В3	Л1.3Л2.2 Э1 Э2 Э3 Э4			
2.6	Численное решение дифференциальных уравнений, полученных на основе уравнений формальной кинетики. /Ср/	5	6	ПК-2-В1 ПК-2-В2 ПК-2-В3	Л1.4 Э3 Э4			
2.7	Решение рассмотренных на практике задач с помощью встроенных функций пакетов прикладных программ. /Ср/	5	10	ПК-2-У2 ПК-2-У3 ПК-2-В1	Э3 Э4			
	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/	5	1	ПК-2-31 ПК-2-32 ПК-2-33 ОПК-1-33 ОПК-1-В1 ОПК-1-В3	Л1.6Л3.2 Э3 Э4			
3.2	Первичная обработка экспериментальных данных. /Пр/	5	3	ПК-2-У1 ПК-2-В1 ПК-2-В2 ПК-2-В3	Л1.4 Л1.6 Э3 Э4			
3.3	Первичная обработка данных в пакетах прикладных программ. /Ср/	5	2	ПК-2-У1 ПК-2-В1 ПК-2-В2 ПК-2-В3	Э3 Э4			
3.4	Планирование экспериментов в табличном процессоре. /Пр/	5	8	ПК-2-31 ПК-2-У1 ПК-2-У2 ПК-2-В1	Э3 Э4			

3.5	3.2 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/	5	1	ПК-2-33 ПК-2-У2 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/	5	10	ПК-2-33 ПК-2-У2 ПК-2-В1 ПК-2-В2 ПК-2-В3 ОПК-1-33	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/	5	1	ПК-2-33 ПК-2-У2 ПК-2-У3 ПК-2-В1 ОПК-1-33	Л1.5 Л1.6 Э1 Э2 Э3 Э4			
4.2	Практическая реализация некоторых существующих математических моделей для прогнозирования показателей качества кокса в табличном процессоре. /Ср/	5	2	ПК-2-В1 ОПК-1-33	Л1.6Л3.1 Э3 Э4			
4.3	Изучение обзорных статей в области моделирования и прогнозирования показателей качества кокса. /Ср/	5	40	ПК-2-31 ОПК-1-33 ОПК-1-В1	Э1			
	Раздел 5. Зачёт с оценкой							
5.1	Зачёт с оценкой /Экзамен/	5	9					
	Раздел 6. Подготовка к контрольным мероприятиям и выполняемым работам							
6.1	Объем часов самостоятельной работы на подготовку к КМ /Ср/	5	0					
6.2	Объем часов самостоятельной работы на подготовку к ВР /Ср/	5	0					

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		Оценить с физико-химической точки зрения, при каком значении pH происходит переход PbSO_4 в $\text{Pb}(\text{OH})_2$. 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 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.
-----	--------------------	--	--

КМ2	Вопросы к зачёту с оценкой		Перечень вопросов к экзамену Общие вопросы моделирования: 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_s 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 Вант-Гоффа, 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 план однофакторного эксперимента Проверка адекватности полученного уравнения и его использование для оптимизации процесса. Получение экспоненциальной зависимости по результатам однофакторных экспериментов. 20. 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. 21. 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. 22. Многоуровневые многофакторные планы, использующие свойства латинских квадратов. Построение планов. Получение и использование для оптимизации уравнений различной структуры. 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: 24. Решение нелинейного уравнения методом деления отрезка пополам; 25. Решение нелинейного уравнения методом Ньютона; 26. Решение нелинейного уравнения методом хорд; 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; 28. Решение дифференциального уравнения методом Рунге-Куты четвёртого порядка. Адаптация метода Рунге-Куты на случай систем дифференциальных уравнений. Особенности решения систем дифференциальных уравнений при
КМЗ	Темы рефератов		5.2. Темы письменных работ Примерные темы рефератов: 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		Аудиторные работы. Блок № (БЛ): БЛ №1 «Общие вопросы моделирования» №1. Составить блок-схему для вычисления суммы квадратов первых N чисел натурального ряда. №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.

P2	Аудиторные работы Аналитический подход	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. №2. Рассчитать ионно-молекулярный состав раствора в присутствии растворённой угольной кислоты 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. №3. Значение pH раствора регулируется изменением концентрации соды. Рассчитать концентрацию $[CO_3^{2-}]$ ионов в растворе, с учётом растворённой угольной кислоты 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. №4. При каком значении pH достигается практически полное осаждение MnS ($IPMnS = 2.5 \cdot 10^{-10}$), 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? №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 p_{CO}. №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 K1 – K6 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 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. №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. №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. №9. Пользуясь результатами задачи №6 исключить из системы нелинейных уравнений уравнение (1), (3), (5). Решить полученную систему уравнений эвристическим методом. Сделать вывод о влиянии уравнения (1) на моделируемую систему и итоговое значение pH. №10. Решить нелинейное уравнение из задачи (6) с помощью встроенных функций специализированной программы MathCad. Сравнить полученное значение с уже полученными. №11. Решить систему нелинейных уравнений из задачи (6) с помощью встроенных функций специализированной программы MathCad. Сравнить полученное значение с уже полученными. №12. Исходя из понятия линейная зависимость/независимость химических реакций, с помощью встроенных математических функций MathCad для системы реакций Определить количество линейно-независимых химических реакций. Что это означает с точки зрения математического описания данной системы реакций. №13. Для необратимой реакции первого порядка: Составить дифференциальное уравнение скорости изменения концентрации A. 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). №14. Для последовательной схемы необратимых химических реакций первого порядка: A Составить систему дифференциальных уравнений и решить её с помощью метода Эйлера, модифицированного Эйлера, Рунге-Кутта 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).
--	--	--	--

Р3	Аудиторные работы Экспериментальный подход		БЛ №3 «Экспериментальный подход» №15. С надёжностью $P = 0,95$ обеспечить однородность представленных в таблице данных, исключив грубые ошибки. Решение данной задачи осуществить на основе двух методов: правила 2σ и критерия максимального отклонения g. Расчёты выполнить с использованием табличного процессора. №16. С помощью анализа однородности средних. Дать заключение о возможности преимущества ($P = 0,95$) одного аппарата перед другим по производительности. Расчёты выполнить с использованием табличного процессора. №17. Для проверки правильности вольтамперометрической (ВА) методики определения кадмия Cd использовали атомно-абсорбционную (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 Содержит ли вольтамперометрическая методика систематическую погрешность? Расчёты выполнить с использованием табличного процессора без использования специальной надстройки. №18. Решить задачу №17 используя надстройку табличного процессора. №19. Используя три различных генерирующих соотношения, составить планы экспериментов ДФЭ25-2. Записать формулы для расчёта коэффициентов линейной модели. №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 CI (мм), диаметра гранул CI (мм), величины разряжения CI (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.
Р4	Аудиторные работы Комбинированный подход		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. 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.

P5	Дополнительные темы для практических занятий		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 четвертого 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 (описание билетов, тестов 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

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

«МИСиС»

НОВОТРОИЦКИЙ ФИЛИАЛ

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 дифференциально-спектрофотометрическим 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.

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

Текущий контроль:

1) задачи

2) контрольные вопросы (на основе вопросов к экзамену)

3) рефераты.

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

6.1. Рекомендуемая литература

6.1.1. Основная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год, эл. адрес
--	---------------------	----------	------------	------------------------------

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год, эл. адрес
Л1.1	А.Г.Дьячко	Математическое и имитационное моделирование производственных систем: монография		Москва: МИСиС, 2007, https://lib.msk.misis.ru/elib/view.php?id_abs=421737
Л1.2	Б.Я.Советов, С.А.Яковлев	Моделирование систем. Практикум: учебное пособие		Москва: Высшая школа, 2003,
Л1.3	А.Ю.Закгейм	Общая химическая технология: введение в моделирование химико-технологических процессов: Учеб.пособие		М.: Логос, 2012,
Л1.4	Н.А.Самойлов	Примеры и задачи по курсу "Математическое моделирование химико - технологических процессов": Учебное пособие		СПб, Лань, 2013,
Л1.5	А.М. Гумеров	Математическое моделирование химико - математических процессов: Учебное пособие		СПб, Лань, 2014,
Л1.6	Саблин А.В.	Моделирование химико-технологических процессов: учебное пособие		НФ НИТУ МИСиС, 2016, www.nf.misis.ru

6.1.2. Дополнительная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год, эл. адрес
Л2.1	Н.А.Бурмистрова	Математическое моделирование экономических процессов: Монография		М.: Логос, 2010,
Л2.2	В.В. Буданов, Т.Н. Ломова, В.В. Рыбкин	Химическая кинетика: учебное пособие		Лань, 2014,
Л2.3	Соловьев В.П., Богатов Е.М.	Организация эксперимента: учебное пособие		ТНТ, 2016,

6.1.3. Методические разработки

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год, эл. адрес
Л3.1	В.А.Карасёв, Л.З.Румшинский	Организация эксперимента: Учебно - метод. пособие: N105		М.: МИСиС, 1986, http://elibrary.misis.ru
Л3.2	Б.Л.Каширин, В.А.Карасёв, Р.С.Тишакова	Организация эксперимента: Метод. указания : N1174		М.: МИСиС, 1986, http://elibrary.misis.ru
Л3.3	Румшинский Л.З.	Организация эксперимента: Учебно-методическое пособие № 1071		Ротапринт МИСиС, 1984, http://elibrary.misis.ru

6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»

Э1	Поиск статей журнала Fuel, издательство Elsevier	https://www.sciencedirect.com/journal/fuel
Э2	База данных "Термические Константы Веществ"	http://www.chem.msu.su/cgi-bin/tkv.pl?show=welcom.html
Э3	Сайт для загрузки Maxima	https://ru.vessoft.com/software/windows/download/maxima
Э4	Сайт для загрузки SMATH Studio	https://ru.smath.com/cloud/

6.3 Перечень программного обеспечения

П.1	WinPro 10 RUSUpgrdOLVNLEachAcademicAP
П.2	Microsoft Office Standart 2013 Russian OLP NL AcademicEdition
П.3	Microsoft Office Standard 2013 Russian OLP NL AcademicEdition;
П.4	Microsoft Office Professional Plus 2013 Russian OLP NL AcademicEdition;

П.5	Microsoft Office Standard 2007 Russian OpenLicensePack NoLevel Acdmc
П.6	Microsoft Office 2010 Russian Academic OPEN 1 License No Level
П.7	Microsoft Office 365 ProPlusEdu ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr STUUseBnft
6.4. Перечень информационных справочных систем и профессиональных баз данных	
И.1	База данных "Термические Константы Веществ" http://www.chem.msu.su/cgi-bin/tkv.pl?show=welcom.html

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Ауд.	Назначение	Оснащение
121	Учебная аудитория для занятий лекционного типа, практических занятий	Комплект учебной мебели на 56 мест для обучающихся, 1 стационарный компьютер для преподавателя (выход в интернет), проектор, экран настенный, колонки, доска аудиторная меловая, веб камера Logitech, лицензионные программы MS Office, MS Teams, антивирус Dr.Web.

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 кон-трольных 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 Canvas по адресу курса <https://lms.misis.ru/enroll/XHRX69>

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.