

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Котова Лариса Анатольевна
Должность: Директор филиала
Дата подписания: 01.06.2026 19:35:03
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	очная		
Общая трудоемкость	4 ЗЕТ	Виды контроля в семестрах:	
Часов по учебному плану	144	зачет с оценкой 8 контрольная работа 8	

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	8 (4.2)		Итого	
	Неделя 10			
Вид занятий	уп	рп	уп	рп
Лекции	36	36	36	36
Практические	36	36	36	36
В том числе инт.	12	12	12	12
Итого ауд.	72	72	72	72
Контактная работа	72	72	72	72
Сам. работа	72	72	72	72
В том числе сам. работа в рамках ФОС		62		
Итого	144	144	144	144

Программу составил(и):

к.т.н., Доцент, Алексеев Данил Игоревич

Рабочая программа дисциплины

Моделирование химико-технологических процессов

Составлен на основании учебного плана:

18.03.01_23_ХимТехнология_ПрПЭиУМ.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

Кафедры математики и естествознания (Новотроицкий филиал)

Протокол от 11.03.2026 г., №3.

Руководитель подразделения Швалёва Анна Викторовна.

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	Решение прикладных задач с использованием MATLAB	
2.1.2	Теоретические основы химической технологии топлива и углеродных материалов	
2.1.3	Аналитическая химия и физико-химические методы анализа	
2.1.4	Химия высокомолекулярных соединений	
2.1.5	Массообменные процессы химической технологии	
2.1.6	Химическая технология топлива и углеродных материалов	
2.1.7	Физическая химия	
2.1.8	Информатика	
2.1.9	Начертательная геометрия и инженерная графика	
2.1.10	Химия	
2.1.11	Курсовая научно-исследовательская работа	
2.1.12	Учебная практика	
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 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 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 уравнению
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-У3 проводить первичную обработку статистических данных
ПК-2-У2 на основе статистических методов сопоставлять работу аналогичного оборудования (анализ однородности средних)
ПК-2-У1 учитывать слияние подсистем на общее поведение системы
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 навыками применения справочной литературы
ОПК-1-В2 навыками расчёта недостающих термодинамических параметров (метод Тёмкина-Шварцмана)
ОПК-1-В1 приёмами поиска экстремума по уравнению модели
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 навыками численного решения нелинейных и дифференциальных уравнений в табличном процессоре
ПК-2-В2 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/	8	6	ПК-2-31 ОПК-1-32 ОПК-1-У1	Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3Л3.1 Л3.2 Л3.3 Э3 Э4			Р1
1.2	Изучение математических моделей из биологии (модель хищник-жертва) и военного дела (модель танкового боя). /Ср/	8	10	ОПК-1-У1 ОПК-1-У2 ОПК-1-У3	Л1.2Л2.1 Л2.2 Л2.3Л3.2 Э1 Э3 Э4			
	Раздел 2. Аналитический подход							

2.1	<p>2.1 Понятие о физико-химическом моделировании. Основные сведения из курса "Физическая химия". Термодинамика химических превращений. Направление химических реакций. Уравнение изотермы химической реакции. Способы описания концентрации реагирующих веществ. Изменение энергии Гиббса в ходе реакции. Уравнение изотермы химической реакции в стандартных условиях. Связь между константами равновесия в зависимости от способа описания состава реакционной смеси. Гетерогенное химическое равновесие: запись констант равновесия. Определение констант равновесия при различных температурах. Понятие о линейной зависимости химических реакций. Метод Тёмкина-Шварцмана для расчёта констант равновесия. Расчёт константы равновесия на основе равновесных концентраций реагирующих веществ. Расчёт равновесных концентраций на основе константы равновесия. Методика расчёта равновесных концентраций при одновременном протекании нескольких реакций (методика моделирования равновесного состава раствора). Ограничения термодинамического подхода в случае моделирования (расчёта) равновесного состава /Лек/</p>	8	10	ОПК-1-У3 ОПК-1-В2 ОПК-1-В3	Л1.1Л2.1 Л2.2 Л2.3Л3.1 Л3.2 Л3.3 Э1 Э2 Э3 Э4			Р2
2.2	<p>Представление алгоритма в виде блок-схем. Решение задач в табличном процессоре. /Пр/</p>	8	4	ПК-2-У1 ПК-2-У2 ПК-2-У3 ОПК-1-33	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2 Л2.3Л3.2 Л3.3 Э1 Э3 Э4			
2.3	<p>Численное решение нелинейных уравнений, полученных на основе протекающих химических реакций. /Пр/</p>	8	12	ПК-2-31 ОПК-1-В2 ОПК-1-В3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1Л3.1 Л3.3 Э2 Э3 Э4			

2.4	2.2 Кинетические особенности протекания химических реакций. Методика составления систем уравнений, описывающих равновесные концентрации веществ, принимающих участие в химических реакциях. /Лек/	8	2	ОПК-1-В1	Л1.2Л2.2Л3. 2 Э1 Э2 Э3 Э4			
2.5	Численное решение дифференциальных уравнений, полученных на основе уравнений формальной кинетики. /Пр/	8	6	ПК-2-31 ПК-2-У1 ОПК-1-У3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.3Л3. 2 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/	8	4	ПК-2-31 ПК-2-32 ПК-2-У1	Л1.4Л2.1Л3. 2 Э3 Э4			Р3
3.2	Первичная обработка экспериментальных данных. /Пр/	8	4	ПК-2-32 ПК-2-33 ОПК-1-В1 ОПК-1-В2	Л1.4Л2.1Л3. 3 Э3 Э4			
3.3	Планирование экспериментов в табличном процессоре. /Пр/	8	8	ПК-2-32 ПК-2-33 ПК-2-В2 ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ОПК-1-У2 ОПК-1-У3 ОПК-1-В1 ОПК-1-В3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.3Л3. 2 Э3 Э4			

3.4	<p>3.2 Планирование и обработка результатов однофакторного эксперимента. Формализация экспериментальных данных методом наименьших квадратов. Симметричный и равномерный план однофакторного эксперимента. Проверка адекватности полученного уравнения и его использование для оптимизации процесса. Получение экспоненциальной зависимости по результатам однофакторных экспериментов. Двухуровневые планы многофакторных экспериментов. Метод наименьших квадратов при обработке результатов многофакторного эксперимента. Двухуровневый план полного факторного эксперимента ПФЭ_{2n}. Уравнения, получаемые по результатам реализации планов ПФЭ_{2n}. Статистический анализ значимости оценок коэффициентов уравнения, его адекватности и работоспособности. Дробный факторный эксперимент ДФЭ_{2n-n'}. Планирование эксперимента при изменяющемся во времени влиянии на процесс неучтённых факторов. Использование планов ПФЭ_{2n} ДФЭ_{2n-n'} для получения уравнения процесса в виде экспоненциальной зависимости. Рассмотрение примеров. Многоуровневые многофакторные планы, использующие свойства латинских квадратов. Построение планов. Получение и использование для оптимизации уравнений различной структуры. /Лек/</p>	8	10	<p>ОПК-1-31 ОПК-1-32 ОПК-1-33 ОПК-1-У2 ОПК-1-У3 ОПК-1-В1</p>	<p>Л1.4Л2.3Л3. 1 Л3.2 Л3.3 Э3 Э4</p>			
	Раздел 4. Комбинированный подход							

4.1	4.1 Особенности комбинированных математических моделей. Рассмотрение математических моделей из области профессиональной компетенции (прогнозирование показателей качества кокса М25 и М10). /Лек/	8	4	ПК-2-31 ОПК-1-У2 ОПК-1-В1 ОПК-1-В3	Л1.3 Л1.4Л2.2Л3.1 Э1 Э2 Э3 Э4			Р4
4.2	Практическая реализация некоторых существующих математических моделей для прогнозирования показателей качества кокса в табличном процессоре. /Пр/	8	2	ОПК-1-32 ОПК-1-У1 ОПК-1-У3 ОПК-1-В2	Л1.4Л2.2Л3.1 Э3 Э4			
Раздел 5. Подготовка к контрольным мероприятиям и выполняемым работам								
5.1	Объем часов самостоятельной работы на подготовку к КМ /Ср/	8	20	ОПК-1-32 ОПК-1-33 ОПК-1-У1 ОПК-1-У2 ОПК-1-В2	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.2Л3.1 Э2 Э4 Э5 Э6 Э7 Э8		КМ1,К М2	
5.2	Объем часов самостоятельной работы на подготовку к ВР /Ср/	8	42	ПК-2-31 ПК-2-32 ОПК-1-33 ОПК-1-У1 ОПК-1-В1 ОПК-1-В3	Л1.2 Л1.4Л2.1 Л2.3Л3.1 Л3.2 Л3.3 Э1 Э3 Э5 Э6 Э7			

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-У3;ОПК-1-В1;ОПК-1-В2;ОПК-1-В3;ПК-2-31;ПК-2-32;ПК-2-33;ПК-2-У1;ПК-2-У2;ПК-2-У3;ПК-2-В1;ПК-2-В2	<p>Экзамен не предусмотрен.</p> <p>Критерии выставления зачета с оценкой:</p> <p>Отметка "удовлетворительно" выставляется обучающемуся, если домашняя работа выполнена своевременно и в полном объеме. По результатам выполненных заданий по разделам дисциплины процент верных ответов от 70 до 80.</p> <p>Отметка "хорошо" выставляется обучающемуся, если домашняя работа выполнена своевременно и в полном объеме. По результатам выполненных заданий по разделам дисциплины процент верных ответов от 80 до 90.</p> <p>Отметка "отлично" выставляется обучающемуся, если домашняя работа выполнена своевременно и в полном объеме. По результатам выполненных заданий по разделам дисциплины процент верных ответов более 90.</p> <p>Отметка "неудовлетворительно" выставляется обучающемуся, если домашняя работа выполнена не своевременно и / или не в полном объеме, и / или по результатам выполненных заданий по разделам дисциплины процент верных ответов менее 70.</p> <p>Домашнюю работу на проверку предоставляют в виде видеоответов. Видеоответ представляет из себя видеозапись активности экрана компьютера при решении задачи. Перечень задач, необходимых для освоения курса, представлен в разделе «Перечень работ, выполняемых по дисциплине (Курсовая работа, Курсовой проект, РГР, Реферат, ЛР, ПР и т.п.)» данной рабочей программы.</p> <p>Требования к видеозаписям, которые студент должен предоставить для проверки преподавателю:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. качество видео: читабельность демонстрируемых записей, например, читабельность формул, которые студент вводит в ячейки MS Excel; 2. размер файла: на 1 минуту видео должно приходиться от 1 до 2 Мб. Например, если видео имеет продолжительность 16 мин, то размер видеофайла не должен превышать 32 Мб; 3. файл видеоответа должен иметь следующее имя: <u>Фамилия_Группа_ПредметСокращённо_Название задания</u>; 4. не допускается реклама любого характера внутри видеоответа; 5. не допускается деление видеоответа на несколько файлов. <p>В случае, если вы сделали ошибку при записи видеоответа или оговорились и поняли это, то необходимо об этом сообщить в видеозаписи, не отключая записи видео, сделать паузу, проговорить правильный ответ, сопроводив при необходимости демонстрацией на экране.</p> <ol style="list-style-type: none"> 6. при записи видеоответа должна быть включена основная камера, чтобы было видно лицо студента, который записывает видеоответ. Окошко с видеокамеры необходимо расположить в правой верхней части экрана, чтобы было видно основное рабочее пространство экрана. <p>Критерии оценки выполнения домашней работы в виде видеоответов (скринкастов):</p> <p>Подготовленный в виде видеоответа файл домашняя работа оценивается преподавателем по следующим критериям:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Полнота продемонстрированной задачи. Выполнены все необходимые этапы для правильного решения задачи; 2. Продемонстрирован ввод всех данных на лист Excel; 3. Прокомментирован ход решения задачи; 4. Решение представлено верно.
-----	--------------------	--	--

КМ2	Контрольные вопросы для промежуточного контроля	ОПК-1-31;ОПК-1-32;ОПК-1-33;ОПК-1-У1;ОПК-1-У2;ОПК-1-У3;ОПК-1-В1;ОПК-1-В2;ОПК-1-В3;ПК-2-31;ПК-2-32;ПК-2-33;ПК-2-У1;ПК-2-У2;ПК-2-У3;ПК-2-В1;ПК-2-В2	<p>Перечень вопросов к экзамену Перечень вопросов к экзамену 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.
-----	---	--	---

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;ОПК-1-У1;ОПК-1-У2;ОПК-1-У3;ОПК-1-В1;ОПК-1-В2;ОПК-1-В3;ПК-2-31;ПК-2-32;ПК-2-33;ПК-2-У1;ПК-2-У2;ПК-2-У3;ПК-2-В1;ПК-2-В2	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	ОПК-1-31;ОПК-1-32;ОПК-1-33;ОПК-1-У1;ОПК-1-У2;ОПК-1-У3;ОПК-1-В1;ОПК-1-В2;ОПК-1-В3;ПК-2-31;ПК-2-32;ПК-2-33;ПК-2-У1;ПК-2-У2;ПК-2-У3;ПК-2-В1;ПК-2-В2	<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 ($K_{прMnS} = 2.5 \cdot 10^{-10}$), 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 тер-модинамического равновесия получения водяного газа по реакциям: В данном задании достаточно ограничиться выводом кубического уравнения относительно p_{CO}.</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	ОПК-1-31;ОПК-1-32;ОПК-1-33;ОПК-1-У1;ОПК-1-У2;ОПК-1-У3;ОПК-1-В1;ОПК-1-В2;ОПК-1-В3;ПК-2-31;ПК-2-32;ПК-2-33;ПК-2-У1;ПК-2-У2;ПК-2-У3;ПК-2-В1;ПК-2-В2	<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? 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, оставить 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 C_I (Вт/см²), толщина слоя продукта C_{II} (мм), диаметра гранул C_{III} (мм), величины разряжения C_{IV} (мм. рт.ст.) и скважности импульса C_V (%), 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	ОПК-1-31;ОПК-1-32;ОПК-1-33;ОПК-1-У1;ОПК-1-У2;ОПК-1-У3;ОПК-1-В1;ОПК-1-В2;ОПК-1-В3;ПК-2-31;ПК-2-32;ПК-2-33;ПК-2-У1;ПК-2-У2;ПК-2-У3;ПК-2-В1;ПК-2-В2	<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> <ol style="list-style-type: none"> 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 (билеты, тесты и т.п.)

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Новотроицкий филиал

ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО АВТОНОМНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

«Национальный исследовательский технологический университет «МИСИС»

(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 дифференциально-спектрофотметрическим 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.

Аудиторные работы. Блок № (БЛ):

Содержание практического раздела дисциплины

- 1) Алгоритм решения нелинейного уравнения методом хорд;
- 2) Алгоритм решения нелинейного уравнения методом Ньютона;
- 3) Алгоритм решения нелинейного уравнения методом деления отрезка по-полам.
- 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-Кута.
- 10) Использование пакета прикладных программ MathCad для решения систем дифференциальных уравнений.
- 11) Практический анализ существующих моделей в области профессиональной компетенции (прогнозирование показателей качества кокса M25 и M10) в пакете MathCad.
- 12) Использование встроенной надстройки табличного процессора для решения задач математического программирования.
- 13) Использование программы MathCad для решения задач математического программирования.

Перечень тестовых вопросов приведён в LMS Moodle

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

Экзамен не предусмотрен.

Критерии выставления зачета с оценкой:

Отметка "удовлетворительно" выставляется обучающемуся, если домашняя работа выполнена своевременно и в полном объеме. По результатам выполненных заданий по разделам дисциплины процент верных ответов от 70 до 80.

Отметка "хорошо" выставляется обучающемуся, если домашняя работа выполнена своевременно и в полном объеме. По результатам выполненных заданий по разделам дисциплины процент верных ответов от 80 до 90.

Отметка "отлично" выставляется обучающемуся, если домашняя работа выполнена своевременно и в полном объеме. По результатам выполненных заданий по разделам дисциплины процент верных ответов более 90.

Отметка "неудовлетворительно" выставляется обучающемуся, если домашняя работа выполнена не своевременно и / или не в полном объеме, и / или по результатам выполненных заданий по разделам дисциплины процент верных ответов менее 70.

Домашнюю работу на проверку предоставляют в виде видеответов. Видеответ представляет из себя видеозапись активности экрана компьютера при решении задачи. Перечень задач, необходимых для освоения курса, представлен в разделе «Перечень работ, выполняемых по дисциплине (Курсовая работа, Курсовой проект, РГР, Реферат, ЛР, ПР и т.п.)» данной рабочей программы.

Требования к видеозаписям, которые студент должен предоставить для проверки преподавателю:

1. качество видео: читабельность демонстрируемых записей, например, читабельность формул, которые студент вводит в ячейки MS Excel;
2. размер файла: на 1 минуту видео должно приходиться от 1 до 2 Мб. Например, если видео имеет продолжительность 16 мин, то размер видеофайла не должен превышать 32 Мб;
3. файл видеответа должен иметь следующее имя: Фамилия_Группа_ПредметСокращённо_Название задания;
4. не допускается реклама любого характера внутри видеответа;
5. не допускается деление видеответа на несколько файлов. В случае, если вы сделали ошибку при записи видеответа или оговорились и поняли это, то необходимо об этом сообщить в видеозаписи, не отключая записи видео, сделать паузу, проговорить правильный ответ, сопроводив при необходимости демонстрацией на экране.
6. при записи видеответа должна быть включена основная камера, чтобы было видно лицо студента, который записывает видеответ. Окошко с видеокamеры необходимо расположить в правой верхней части экрана, чтобы было видно основное рабочее пространство экрана.

Критерии оценки выполнения домашней работы в виде видеответов (скринкастов):

Подготовленный в виде видеответа файл домашняя работа оценивается преподавателем по следующим критериям:

1. Полнота продемонстрированной задачи. Выполнены все необходимые этапы для правильного решения задачи;
2. Продемонстрирован ввод всех данных на лист Excel;
3. Прокомментирован ход решения задачи;
4. Решение представлено верно.

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

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
Л1.1	А.Г.Дьячко	Математическое и имитационное моделирование производственных систем: монография		Москва: МИСиС, 2007
Л1.2	А.Ю.Закгейм	Общая химическая технология: введение в моделирование химико-технологических процессов: Учеб.пособие		М.:Логос, 2012
Л1.3	А.М. Гумеров	Математическое моделирование химико - математических процессов: Учебное пособие		СПб, Лань, 2014
Л1.4	Саблин А.В.	Моделирование химико-технологических процессов: учебное пособие		НФ НИТУ МИСиС, 2016

6.1.2. Дополнительная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Библиотека	Издательство, год
--	---------------------	----------	------------	-------------------

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

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	
Э5	LMS Moodle	https://newlms.misis.ru/login/index.php?loginredirect=1
Э6	Российская научная электронная библиотека	https://elibrary.ru/
Э7	КиберЛенинка	https://cyberleninka.ru/?from
Э8	НФ НИТУ "МИСИС"	https://nf.misis.ru/

6.3 Перечень программного обеспечения

П.1	Компас 3D V24
П.2	WinPro 10 RUSUpgrdOLVNLEachAcademicAP
П.3	Mathcad 14.0 University Classroom Perpetual
П.4	Microsoft Office Professional Plus 2013 Russian OLP NL AcademicEdition;
П.5	Notepad++
П.6	7-zip
П.7	Браузер Google Chrome
П.8	Microsoft Teams
П.9	Zoom
П.10	Браузер Yandex
П.11	WinDjView 2.0.2

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	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.

127	Учебная лаборатория (компьютерный класс)	Пр	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.
123	Учебная лаборатория (компьютерный класс) Кабинет курсового и дипломного проектирования, самостоятельной работы обучающихся	Ср	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.

8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Освоение дисциплины предполагает как проведение традиционных аудиторных занятий, так и работу в электронной информационно-образовательной среде (ЭИОС), в электронном курсе по дисциплине. Электронный курс позволяет использовать специальный контент и элементы электронного обучения и дистанционных образовательных технологий. Используется преимущественно для асинхронного взаимодействия между участниками образовательного процесса посредством сети «Интернет»

Чтобы эффективно использовать возможности электронного курса, а соответственно и успешно освоить дисциплину, нужно:

- 1) зарегистрироваться на курс;
- 2) ознакомиться с содержанием курса, вопросами для самостоятельной подготовки, условиями допуска к аттестации, формой промежуточной аттестации (зачет/экзамен), критериями оценивания и др.;
- 3) изучать учебные материалы, размещенные преподавателем. В т.ч. пользоваться литературой, рекомендованной преподавателем, переходя по ссылкам;
- 4) пользоваться библиотекой, в т.ч. для выполнения письменных работ (контрольные, контрольные работы, курсовые работы/проекты);
- 5) ознакомиться с заданием к письменной работе, сроками сдачи, критериями оценки. В установленные сроки выполнить работу(ы), подгрузить файл работы для проверки. Рекомендуется называть файл работы следующим образом (название предмета (сокращенно), группа, ФИО, дата актуализации (при повторном размещении)). Если работа содержит рисунки, формулы, то с целью сохранения форматирования ее нужно подгружать в pdf формате.

Работа, размещаемая в электронном курсе для проверки, должна:

- содержать все структурные элементы: титульный лист, введение, основную часть, заключение, список источников, приложения (при необходимости);- быть оформлена в соответствии с требованиями.
- Преподаватель в течение установленного срока (не более десяти дней) проверяет работу и размещает в комментариях к заданию рецензию. В ней он указывает как положительные стороны работы, так замечания. При наличии в рецензии замечаний и рекомендаций, нужно внести поправки в работу, отправить ее заново для повторной проверки. При этом важно следить за сроками, в течение которых должно быть выполнено задание. При нарушении сроков, указанных преподавателем, возможность направить работу остается, но система выводит сообщение о нарушении сроков. По окончании семестра загрузить работу не получится;
- 6) пройти тестовые задания, освоив рекомендуемые учебные материалы
 - 7) отслеживать свою успеваемость;
 - 8) читать объявления, размещаемые преподавателем, давать обратную связь;
 - 9) создавать обсуждения и участвовать в них (обсуждаются общие моменты, вызывающие вопросы у большинства группы);
 - 10) проявлять регулярную активность на курсе.

Преимущественно для синхронного взаимодействия между участниками образовательного процесса посредством сети «Интернет» используется Microsoft Teams (MS Teams). Чтобы полноценно использовать его возможности нужно установить приложение MS Teams на персональный компьютер и телефон. Старостам нужно создать группу в MS Teams. Участие в группе позволяет:

- слушать лекции;- работать на практических занятиях;- быть на связи с преподавателем, задавая ему вопросы или отвечая на его вопросы в общем чате группы в рабочее время с 9.00 до 17.00;- осуществлять совместную работу над документами (вкладка «Файлы»).

При проведении занятий в дистанционном синхронном формате нужно всегда работать с включенной камерой.
Исключение – если преподаватель попросит отключить камеры и микрофоны в связи с большими помехами. На аватарках должны быть исключительно деловые фото.
При проведении лекционно-практических занятий ведется запись. Это дает возможность просмотра занятия в случае невозможности присутствия на нем или при необходимости вновь обратиться к материалу и заново его просмотреть